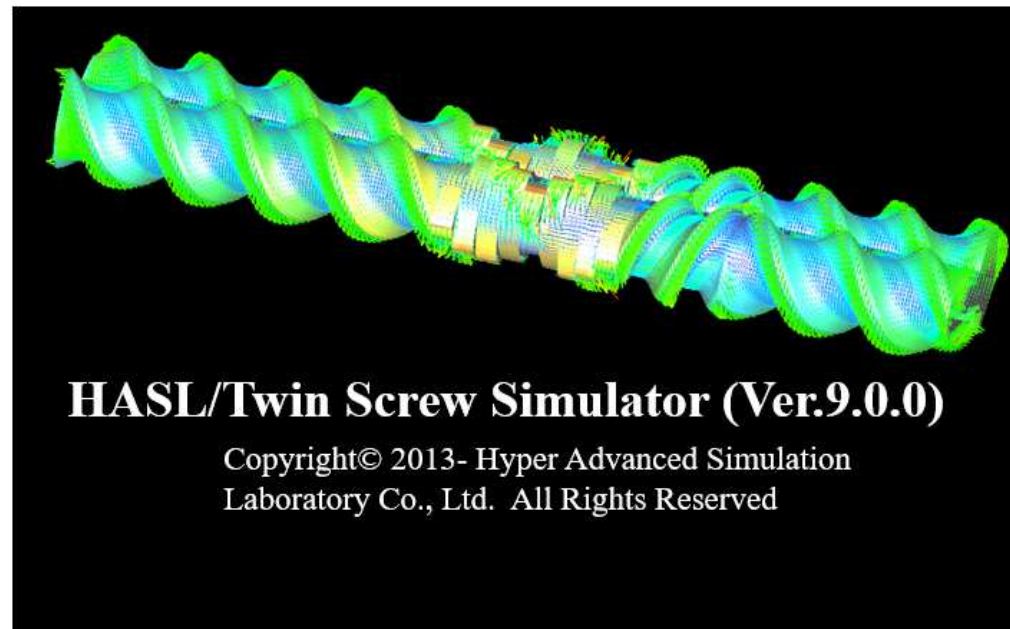


Twin Screw Simulator (Ver.9.0.0)

改良成果資料



2022/09/28

株式会社HASL

○改良成果一覧

① ユーザ定義多成分移流方程式の解析機能の実装

$$(A_i + \mathbf{u} \cdot \nabla) f_i = B_i$$

A_i, B_i : ユーザ定義任意関数 ($i=1 \sim n$)

f_i : ユーザ定義未知関数 ($i=1 \sim n$)

n : ユーザ定義方程式数

$\mathbf{u}$: 流速ベクトル

∇ : ナブラ演算子

用途: 濃度計算

履歴情報計算, 滞留時間分布(RTD)計算

化学反応モデル計算(反応押出解析)

繊維破断, 液滴分裂, 溶融可塑化, etc.

② ユーザ対応改良成果

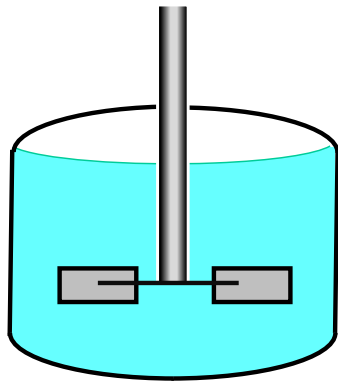
③ TSSカスタマイズ機能

① ユーザ定義移流方程式の解析機能の実装

$$\frac{Df}{Dt} = g$$

: ユーザが自由に定義可能な移流方程式
(連立偏微分方程式)

D/Dt : 物質微分(Material derivative)

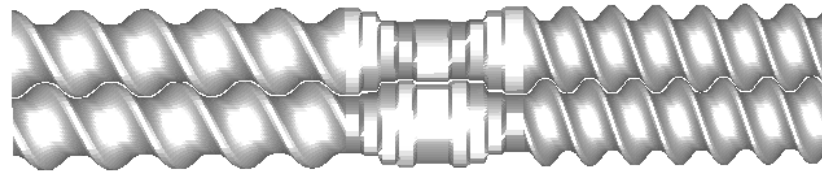


Chemical reactor

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \cancel{u \cdot \nabla f} = g$$

Uniformity

$$\nabla f = 0 \Rightarrow f(t)?$$



Screw extruder

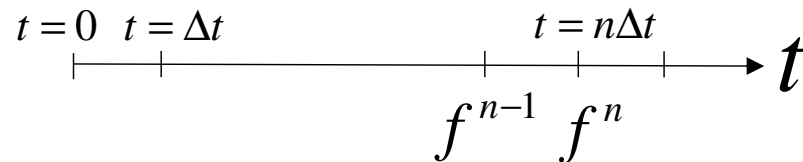
$$\frac{Df}{Dt} = \cancel{\frac{\partial f}{\partial t}} + u \cdot \nabla f = g$$

Steady state

$$\frac{\partial f}{\partial t} = 0 \Rightarrow f(z)?$$

移流方程式の離散化法

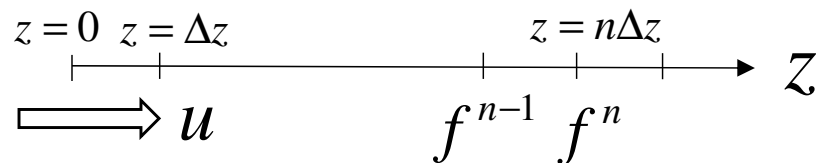
Chemical reactor $\frac{\partial f}{\partial t} = g$



Backward difference

$$\frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta t} = g^n \Rightarrow f^n = f^{n-1} + \Delta t g^n$$

Screw extruder $u \frac{\partial f}{\partial z} = g$



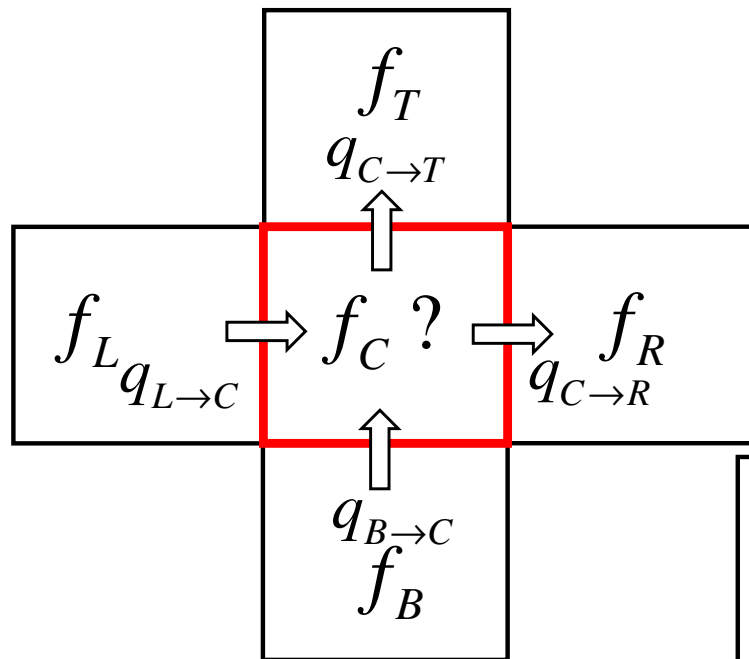
Upwind difference

$$u \frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta z} = g^n \Rightarrow f^n = f^{n-1} + \frac{\Delta z}{u} g^n$$

$$\Updownarrow \text{等価} \\ \because \Delta t = \frac{\Delta z}{u}$$

定常移流方程式の離散化式

$$\mathbf{u} \cdot \nabla f = g$$

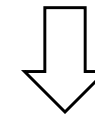


定常状態における濃度収支式
(2D 風上差分表現):

$$f_C (q_{C \rightarrow T} + q_{C \rightarrow R}) - f_L q_{L \rightarrow C} - f_B q_{B \rightarrow C} = \text{vol} \times g$$

流量収支式(非圧縮条件):

$$q_{L \rightarrow C} + q_{B \rightarrow C} = q_{C \rightarrow T} + q_{C \rightarrow R}$$



$$f_C = \frac{f_L q_{L \rightarrow C} + f_B q_{B \rightarrow C} + \text{vol} \times g}{q_{L \rightarrow C} + q_{B \rightarrow C}}$$

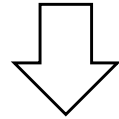
メリット: 全体系で構成された連立方程式を解くことで、濃度分布を容易に定量化可能.

デメリット: 要素分割刻み幅よりスケールの小さい濃度不均一性を表現できない。(解析結果が要素分割密度に依存)

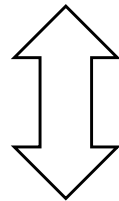
非定常移流方程式の離散化式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f = g$$

後退差分 $\frac{f^n - f^{n-1}}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f^n = g$



$$\left(\frac{1}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) f^n = g + \frac{1}{\Delta t} f^{n-1}$$



$$(A + \mathbf{u} \cdot \nabla) f = B$$

$$A = \frac{1}{\Delta t}, B = g + \frac{1}{\Delta t} f^{n-1}$$

ユーザ定義ルーチン

表1 ユーザが自由にカスタマイズ可能なサブルーチン

ユーザ定義ルーチン名	機能
1) initialsetforchem	化学反応種の初期設定及び解析条件の設定
2) viscal	粘度計算
3) tempcal1	1D温度計算
4) chemfscal	化学反応式の左辺及び右辺荷重ベクトルの設定
5) chemvariable	化学反応成分の代数的関係式の計算
6) chemwrite	化学反応解析結果のファイル出力

コーディングシーケンス

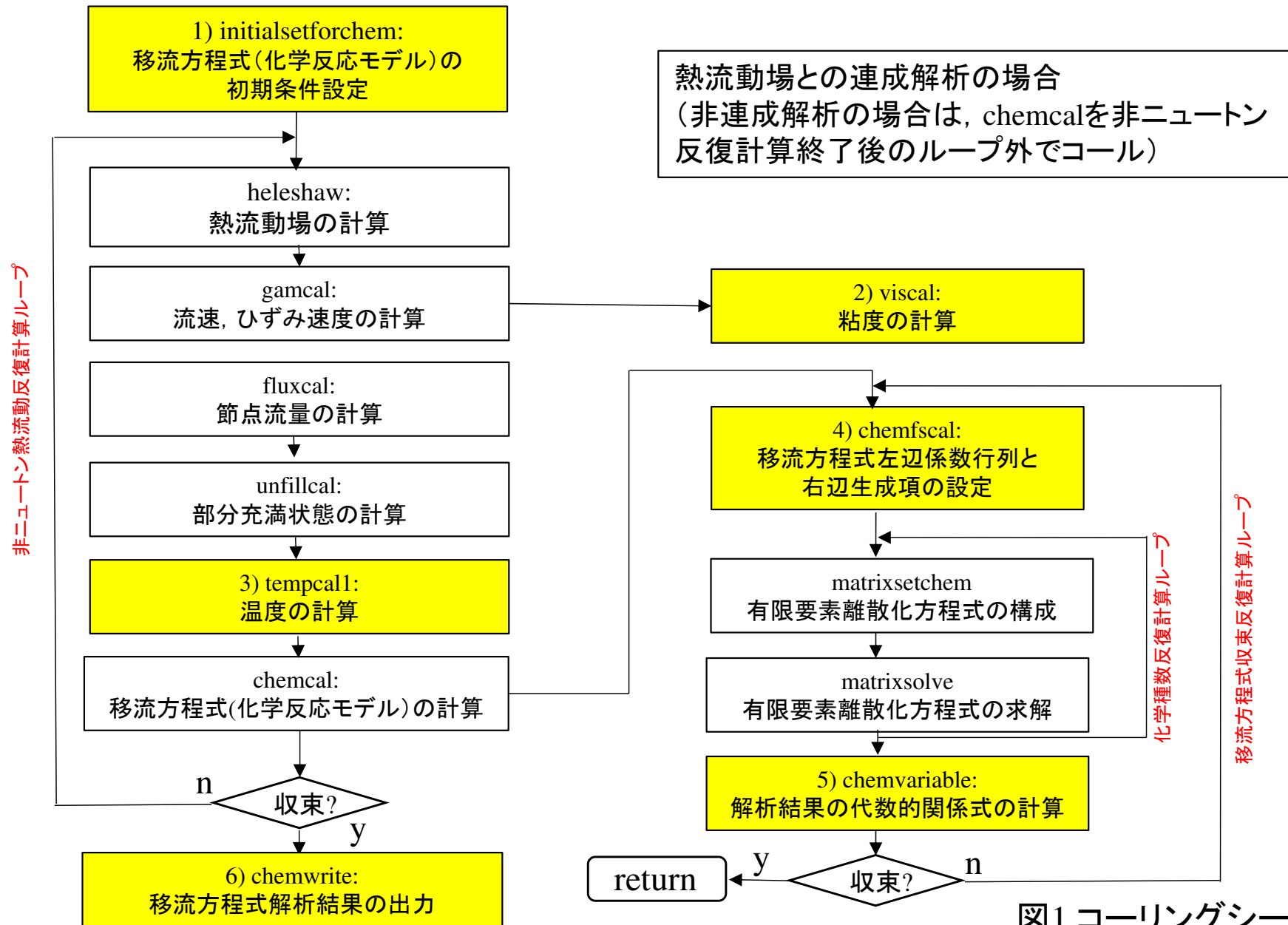


図1 コーディングシーケンス

表2 解析モデル要素情報

変数名	内容
nelem(1)	要素数
iinletnodenum	周方向要素分割数
axialdiv(1)	軸方向要素分割数
inqc(1)	要素構成節点数(inqc(1)=4)
ndiv	肉厚方向の要素分割数
entab(i,j,1)	要素jを構成するi番目の節点番号 ($i=1\sim inqc(1), j=1\sim nelem(1)$)
height(i,1)	要素iの肉厚($i=1\sim nelem(1)$, 単位cm)
vol(i,1)	要素iの体積($i=1\sim nelem(1)$, 単位 cm^3)

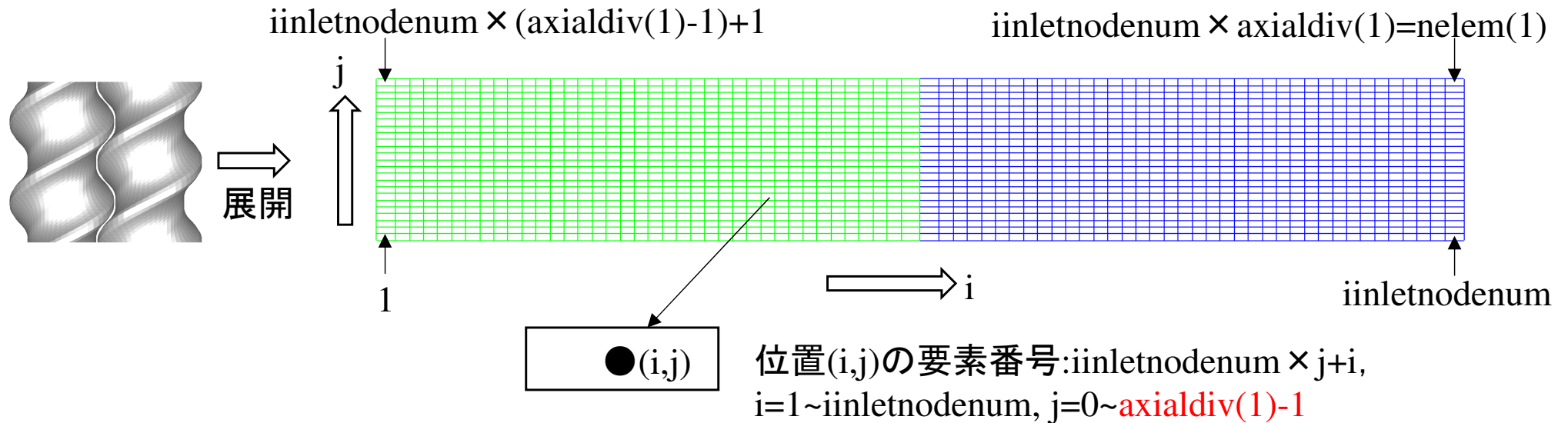


表3 解析モデル節点情報

変数名	内容
nnode(1)	節点数
xnode(i,1),ynode(i,1),znode(i,1)	節点iのx,y,z座標(i=1~nnode(1),単位cm)

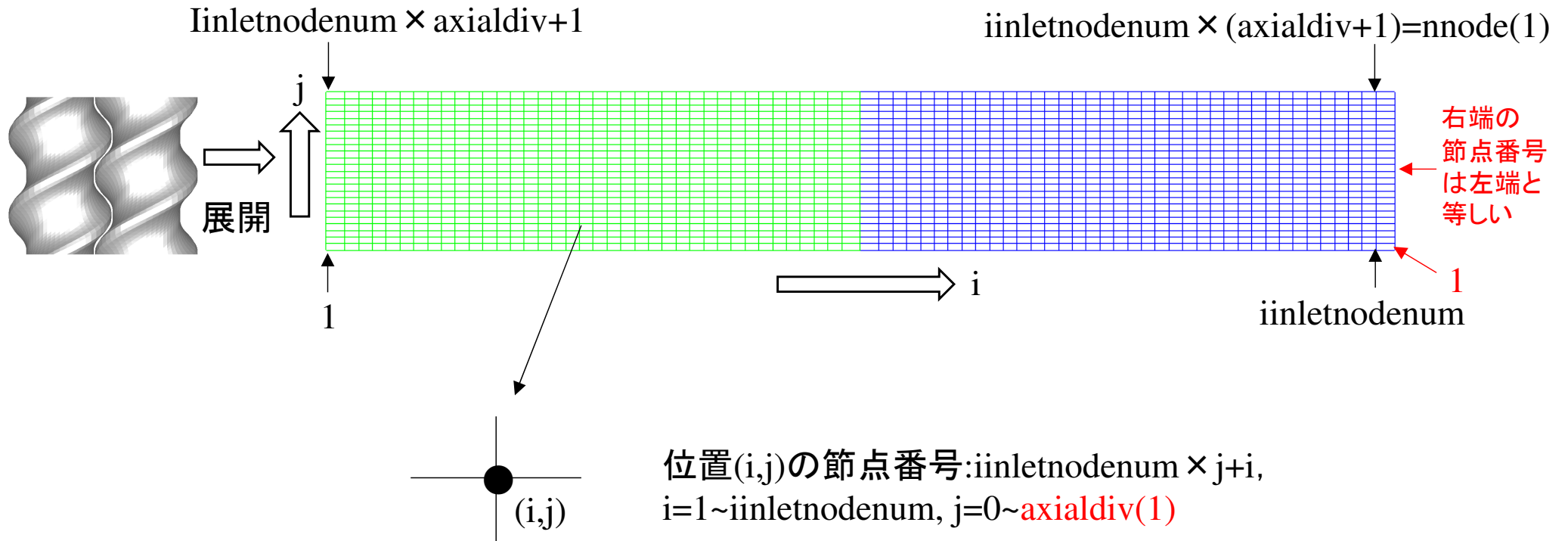


表4 境界条件,成形条件情報

変数名	内容
tempinlet	流入温度(°C)
pprescribedinlet	流入口設定圧力(MPa)
pprescribed	流出口圧力(MPa)
qprescribed	押出量(kg/h)
flowrateinlet	流入口設定流量(cc/s)
rpm	スクリュ回転数(rpm)
href(1,ie,1)	要素ieのスクリュ面熱伝達係数(W/cm ² /K)
tbound(1,ie,1)	要素ieのスクリュ面境界温度(°C)
href(2,ie,1)	要素ieのバレル面熱伝達係数(W/cm ² /K)
tbound(2,ie,1)	要素ieのバレル面境界温度(°C)
iboundt(in,1)	節点inの温度境界条件(0:拘束, 非0:自由)
ibound(in,1)	節点inの圧力境界条件(0:拘束, 非0:自由)

表5 物性情報

変数名	内容
rhoh(i,ie,1)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の密度(g/cm ³)
cph(i,ie,1)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の比熱(J/g/K)
vish(i,ie,1)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の粘度(Pa・s)

i=1 : スクリュ表面, i=ndiv+1 : バレル表面

表6 解析結果要素情報

変数名	内容
temh(i,ie,1)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の温度(°C)
gam(i,ie,1)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)のひずみ速度(J/g/K)
uh(i,ie,1),vh(i,ie,1),wh(i,ie,1)	要素ieの層(i=1~ndiv+1)の流速ベクトル成分(cm/s)
tempe(ie,1)	要素ieの温度
fille(ie,1)	要素ieの充満率

表7 解析結果節点情報

変数名	内容
pres(in,1)	節点inの圧力(Pa)
temp(in,1)	節点inの温度(°C)
visn(in,1)	節点inの粘度(Pa・s)
gamn(in,1)	節点inのひずみ速度(s ⁻¹)

表8 ユーザ定義変数

変数名	内容
chemcnumber	解析対象とする移流方程式の本数(化学種数)
chemvnumber	解析で考慮する配列変数の数
commonvnumber	ルーチン間で共用するスカラー変数の数
chemcname(i)	化学種の名称 (i=1~chemcnumber)
chemvname(i)	配列変数の名称 (i=1~chemvnumber)
chemc(i,ie)	化学種の要素濃度 (i=1~chemcnumber, ie=1~nelem(1))
chemcn(i,in)	化学種の節点濃度 (i=1~chemcnumber, ie=1~nelem(1))
chempar(i,ie)	化学種依存の要素変数 (i=1~chemvnumber, ie=1~nelem(1))
chemparn(i,in)	化学種依存の節点変数 (i=1~chemvnumber, ie=1~nelem(1))
commonvpar(i)	ルーチン間で共用するスカラー変数 (i=1~commonvnumber)

Test sample : 化学反応種単一成分の濃度計算 (理論精度検証)

$$\frac{Df}{Dt} = -\kappa f, \kappa = 0.05$$

Explicit
Iteration :20

$$\frac{Df}{Dt} = u \cdot \nabla f^l = -\kappa f^{l-1}$$

Implicit
Iteration :1

$$\frac{Df}{Dt} = u \cdot \nabla f^l = -\kappa f^l \Rightarrow (\kappa + u \cdot \nabla) f^l = 0$$

$Q_{ex} : 10 \text{ kg/h}$
 $f(0) : 1$



$P_{head} : 3 \text{ MPa}$

表9 ケーススタディ条件

Case	Screw rotation speed [rpm]
1	100
2	200
3	400

$$\frac{Df}{Dt} = -\kappa f^2 \Rightarrow$$

Explicit

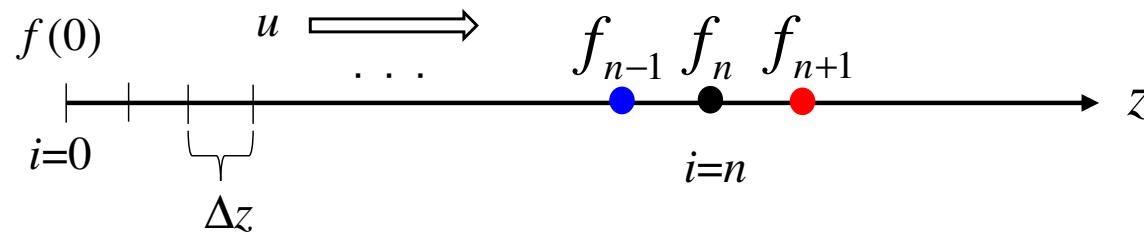
$$\frac{Df}{Dt} = u \cdot \nabla f^l = -\kappa (f^{l-1})^2$$

Implicit

$$\frac{Df}{Dt} = u \cdot \nabla f^l = -\kappa (f^l)^2 \Rightarrow (\kappa f^{l-1} + u \cdot \nabla) f^l = 0$$

$$u \frac{df}{dz} = -\kappa f \Rightarrow f(z) = f(0) \exp\left(-\frac{\kappa}{u} z\right)$$

$u, \kappa > 0$



前進差分:陽解法

$$u \frac{f_{n+1} - f_n}{\Delta z} = -\kappa f_n \Rightarrow f_n = \left(1 - \kappa \Delta z / u\right)^n f(0)$$

後退差分(風上差分):陰解法

$$u \frac{f_n - f_{n-1}}{\Delta z} = -\kappa f_n \Rightarrow f_n = \left(\frac{1}{1 + \kappa \Delta z / u}\right)^n f(0)$$

理論解:

$$f(z) = f(0) \exp\left(-\frac{\kappa}{u} z\right)$$

何れの離散化解も

$$n \rightarrow \infty, \Delta z \rightarrow 0$$

の極限操作によって
理論解と一致

$$\therefore \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \left(1 + \frac{1}{x}\right)^x = e$$

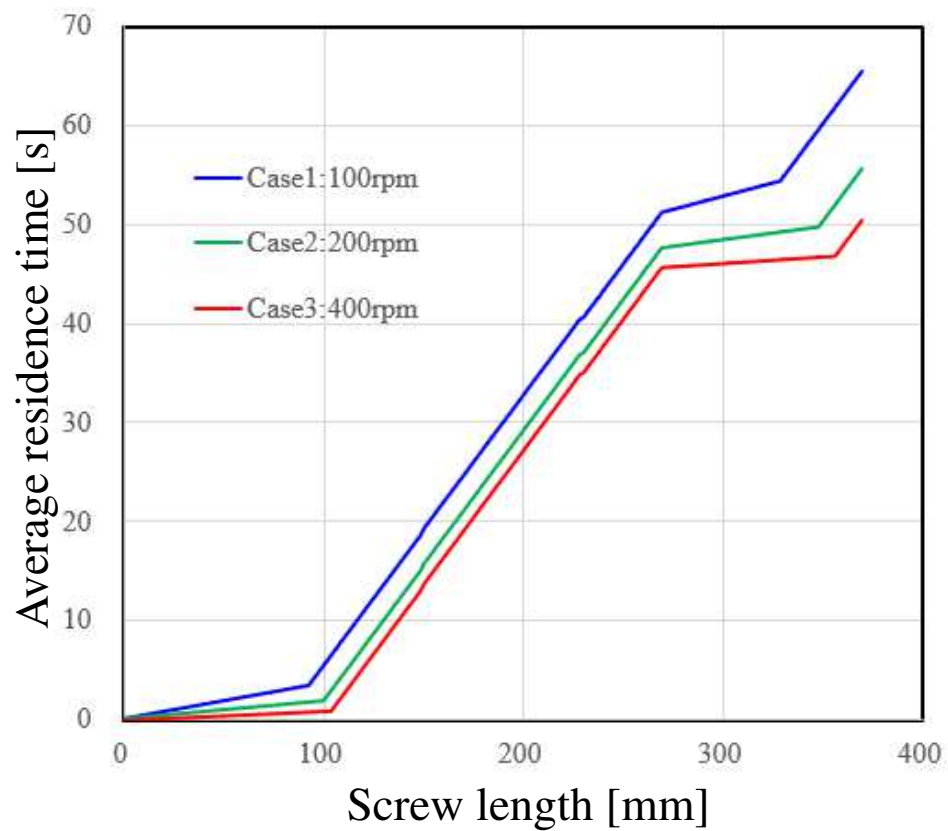


図2 平均滞留時間分布予測結果の比較

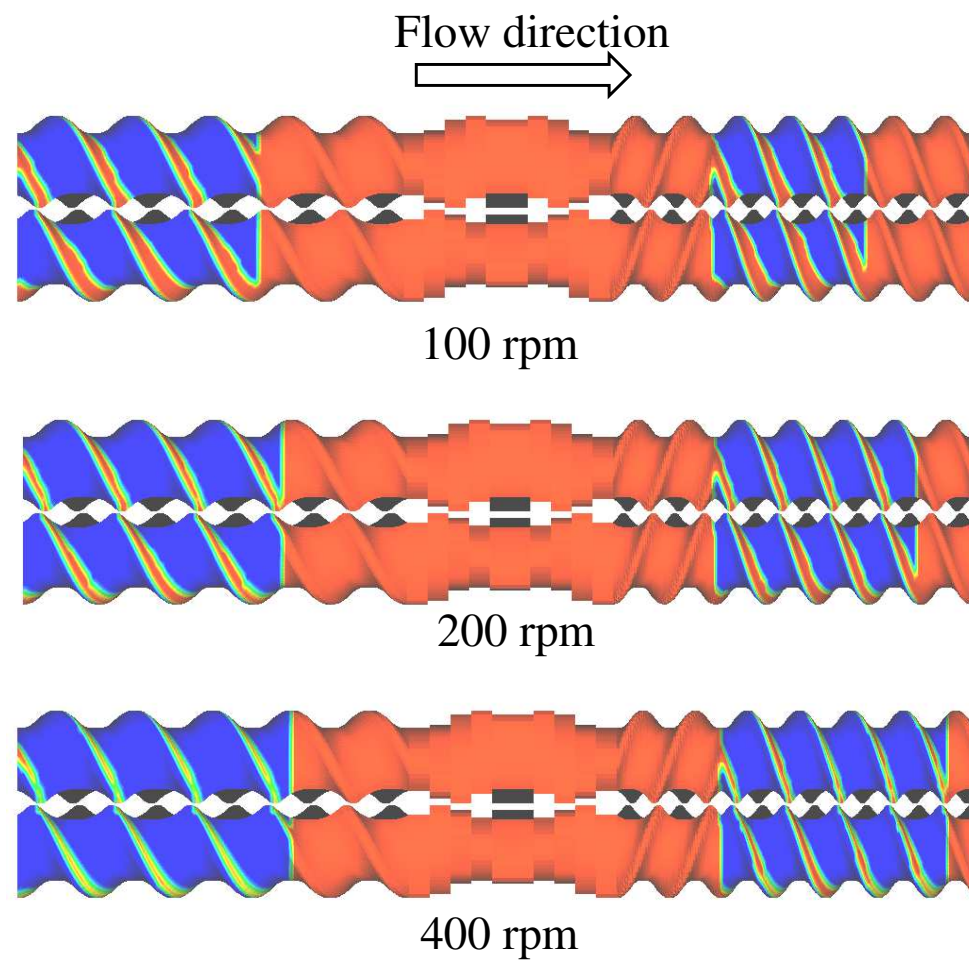


図3 部分充满状態予測結果の比較

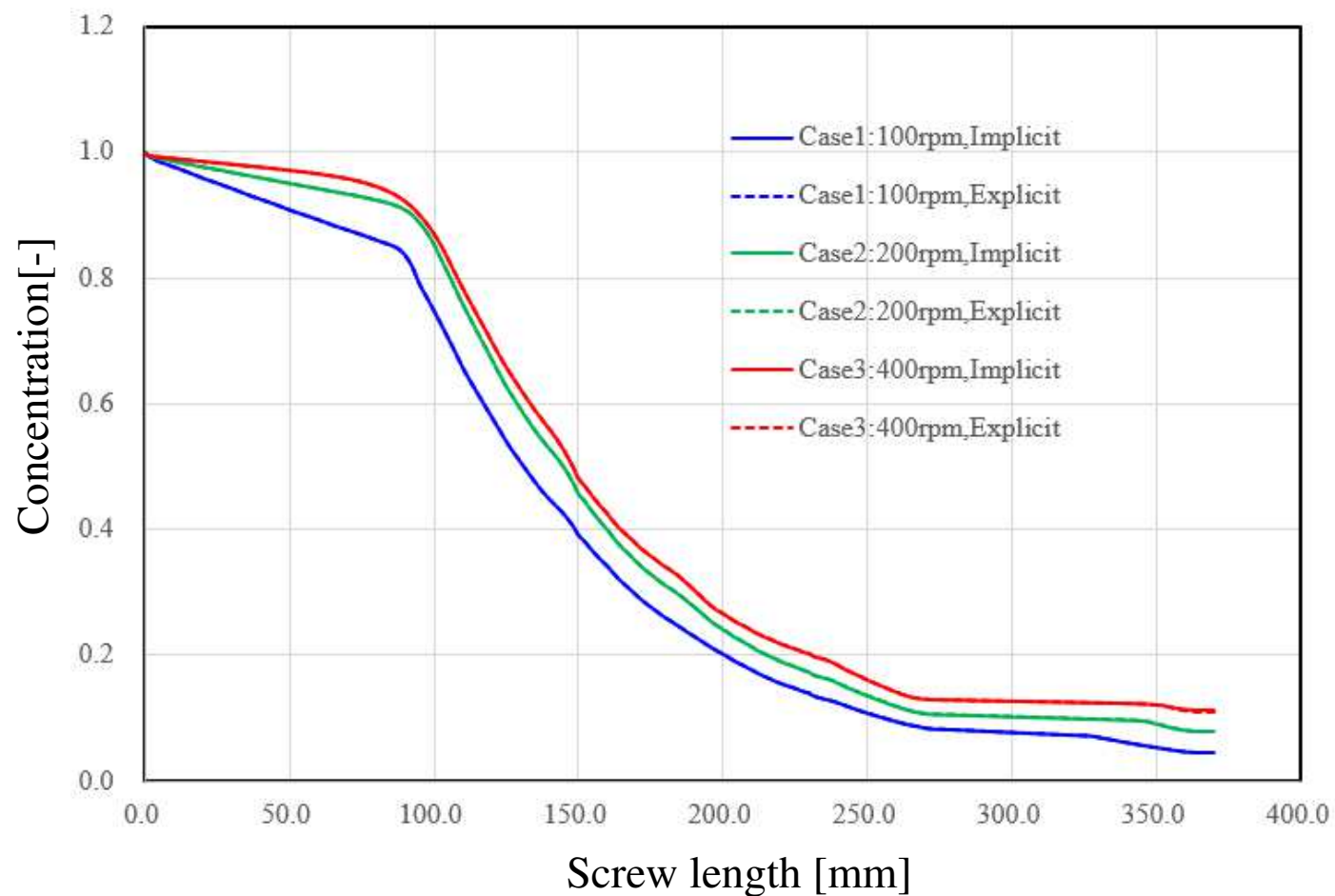
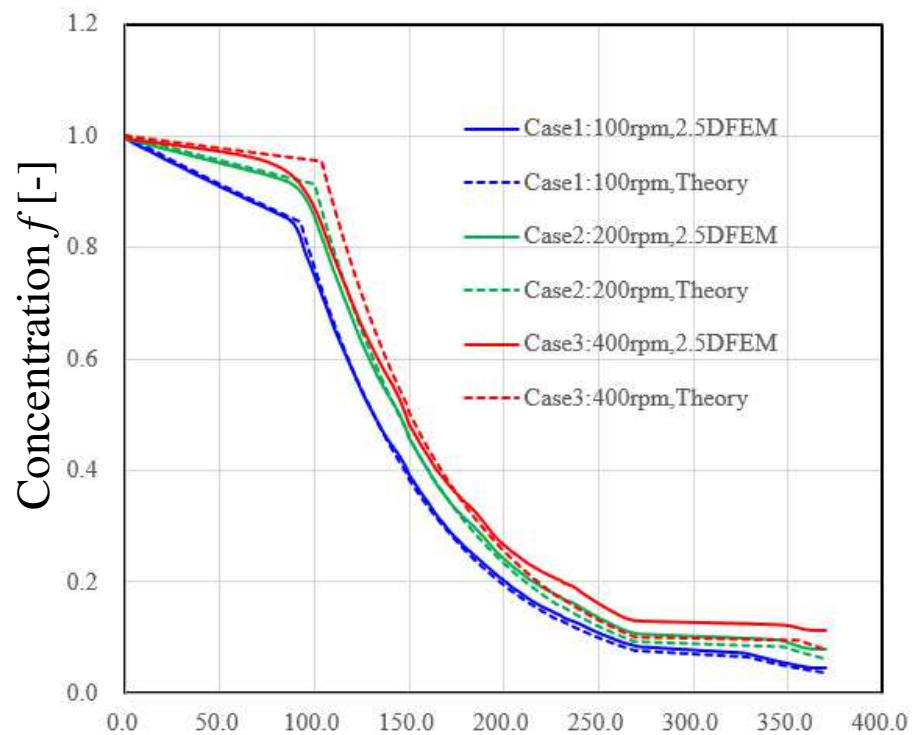


図4 軸垂直断面内体積重み付け化学種濃度陰/陽解析結果平均値の比較



Screw length [mm]

Theory: $f(t) = f(t - \Delta t) \exp(-\kappa \Delta t)$

Δt : Suminf information

図5 軸垂直断面内体積重み付け化学種濃度陰解析結果平均値と理論解の比較

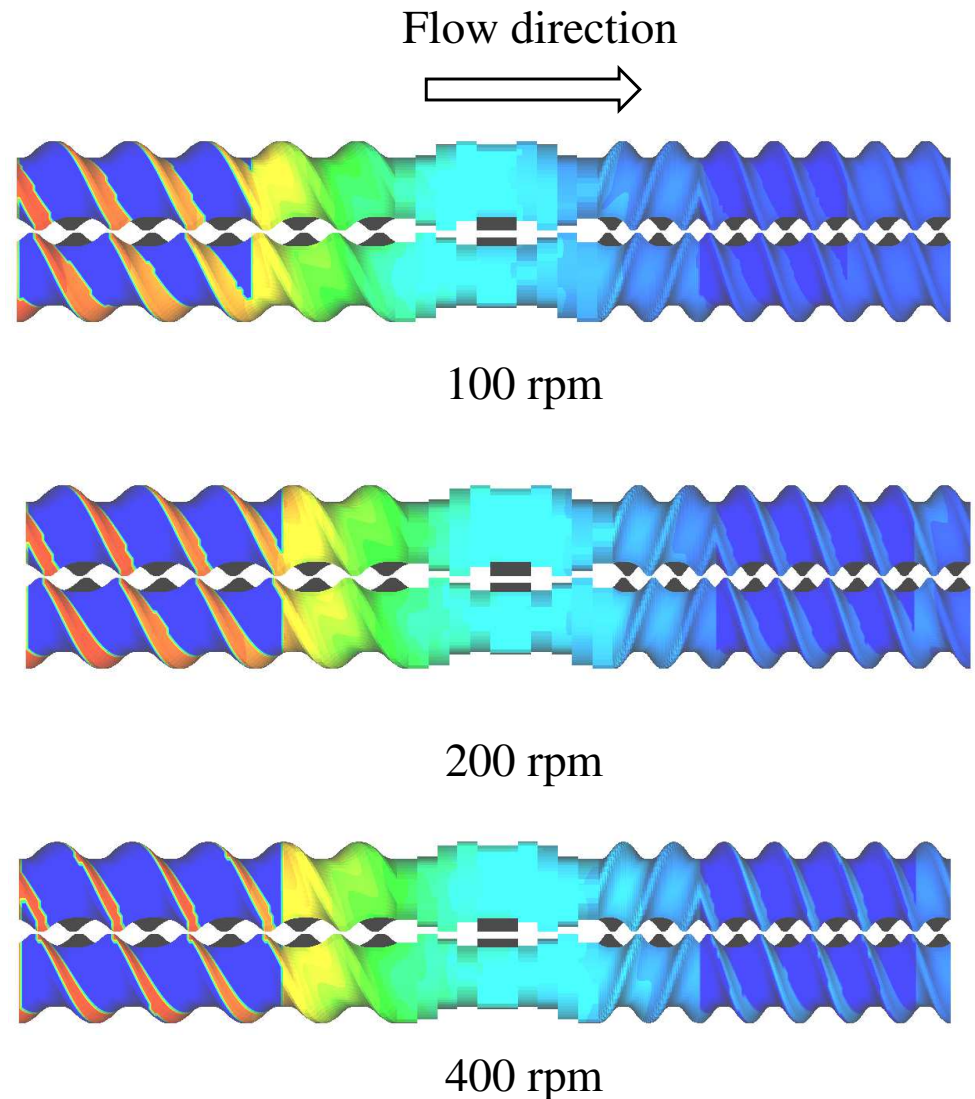


図6 化学種濃度陰解析結果の比較

乖離要因分析

Suminf 情報を利用した予測結果

$$f(z) = f(0) \exp\left(-\frac{\kappa}{u_{ave}} z\right)$$

$$u_{ave} = \frac{1}{2}(u_{fast} + u_{slow})$$

?

=

>

<

TSS output

$$f(z) = \frac{1}{2} f(0) \left(\exp\left(-\frac{\kappa}{u_{fast}} z\right) + \exp\left(-\frac{\kappa}{u_{slow}} z\right) \right)$$

表10 ケーススタディ条件

Case	u_{fast}	u_{slow}	Δu	u_{ave} [mm/s]
A	7	5	2	
B	9	3	6	6
C	11	1	10	

TSSの解析結果には、周方向に発生する流量分布の不均一性が反映されていることが、Suminf情報を利用した計算結果との乖離の要因

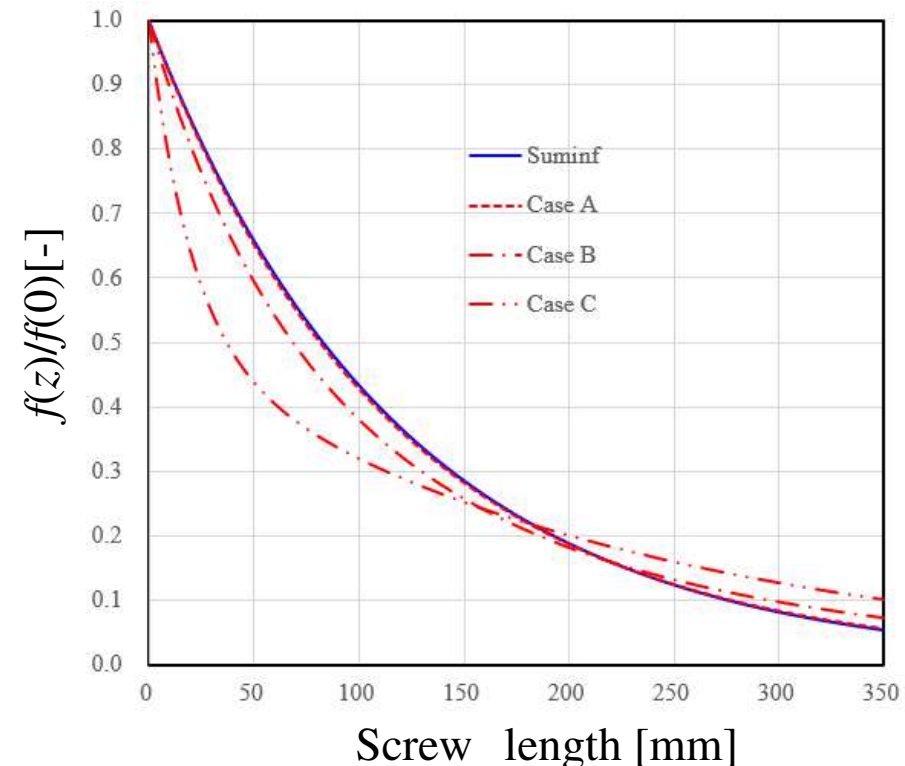


図7 流速差と平均分布量の関係

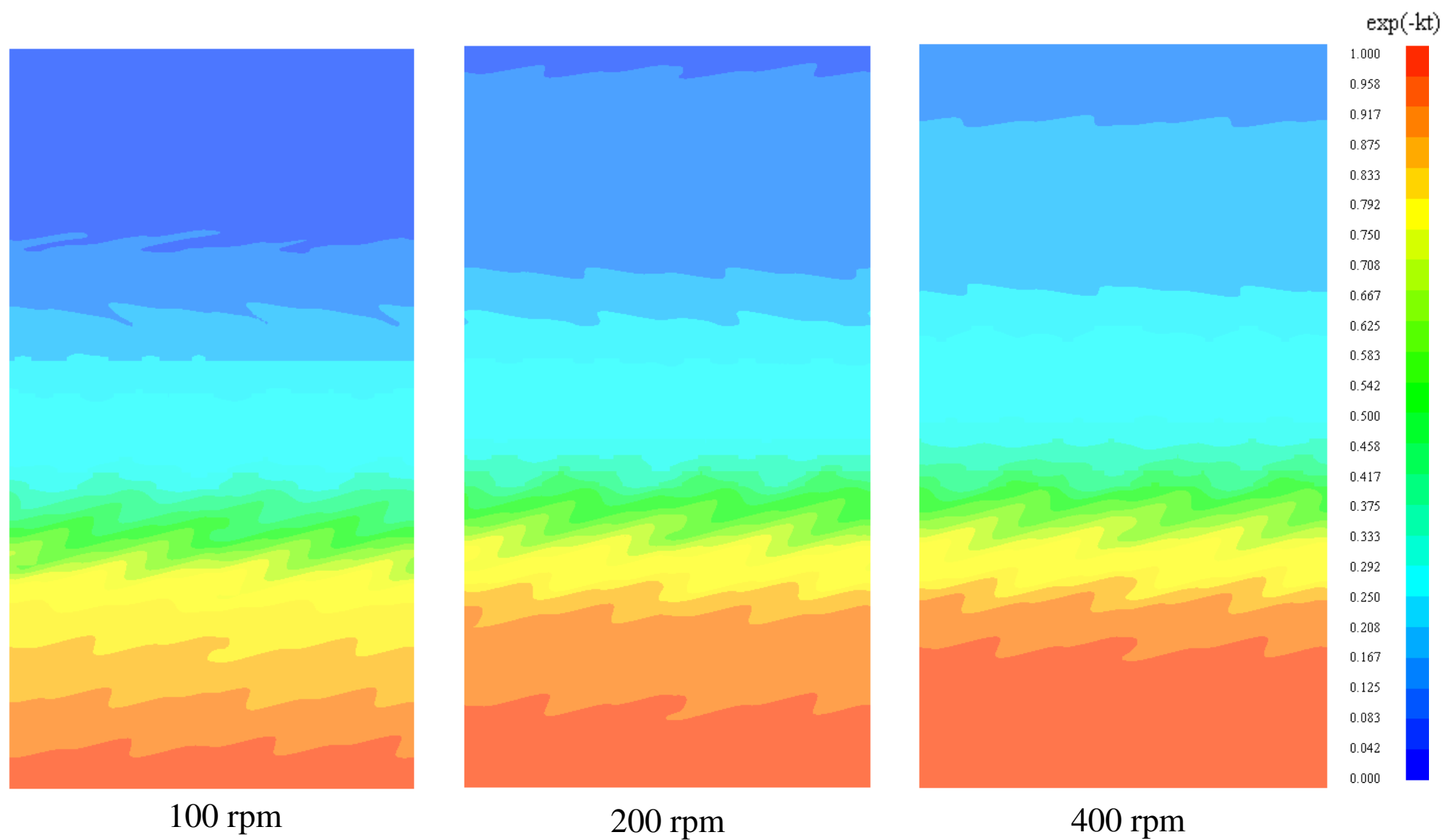
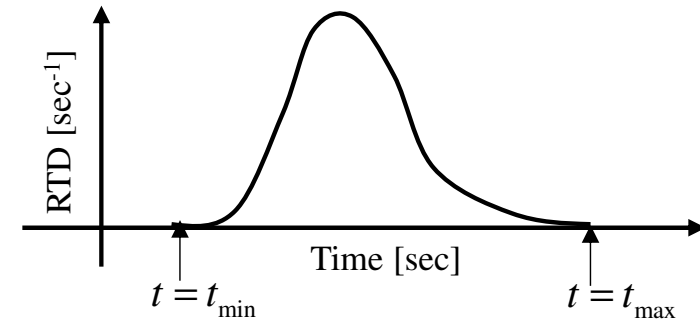


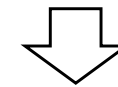
図8 化学種濃度陰解析結果2D展開情報の比較

滞留時間分布(RTD : Residence Time Distribution)の計算

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \cdot \nabla f = 0$$



$$f_{out}(t) = f_{in} \int_0^t RTD(t) dt$$

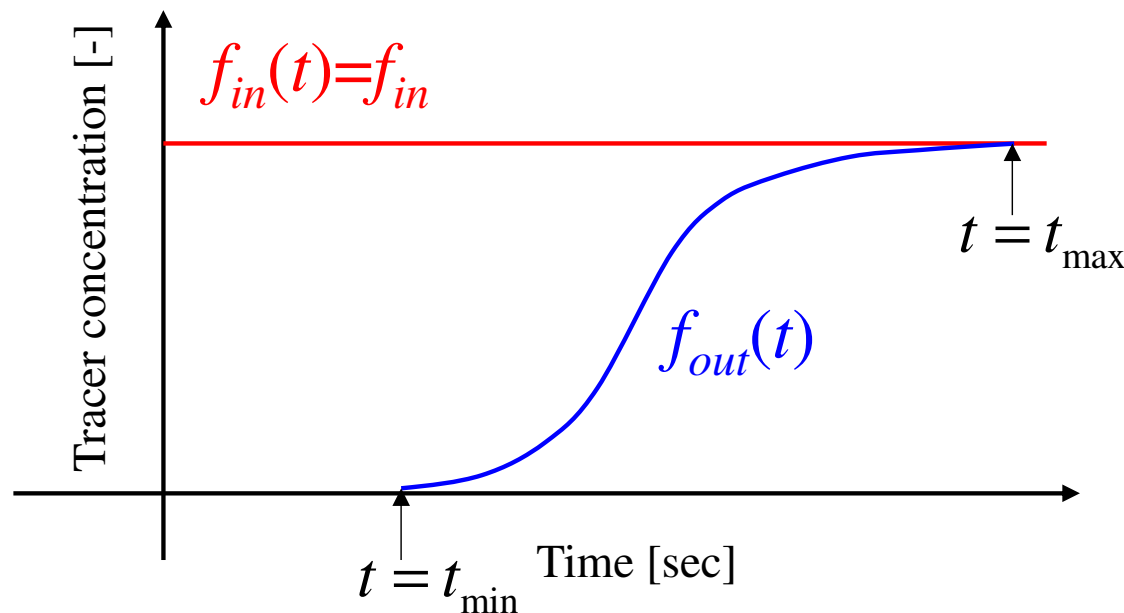


$$RTD(t) = \frac{1}{f_{in}} \frac{df_{out}(t)}{dt}$$

$$\int_{t_{min}}^{t_{max}} RTD(t) dt = 1$$

$$\because f_{out}(t_{max}) = f_{in}$$

$$\langle t_{res} \rangle = \int_{t_{min}}^{t_{max}} t \times RTD(t) dt$$



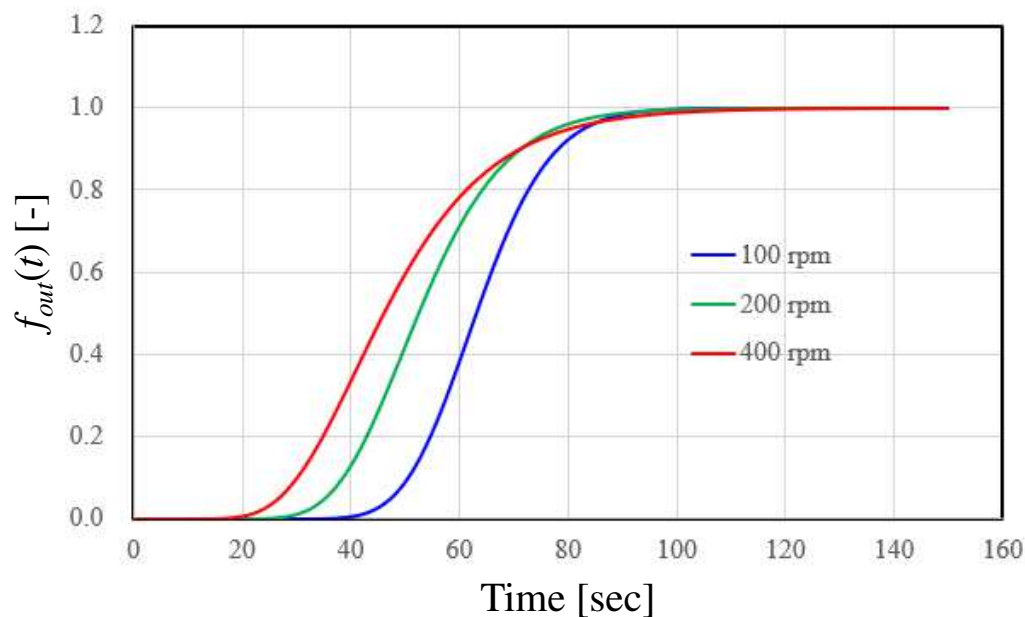


図9 流出口連続体トレーサー濃度予測結果の比較

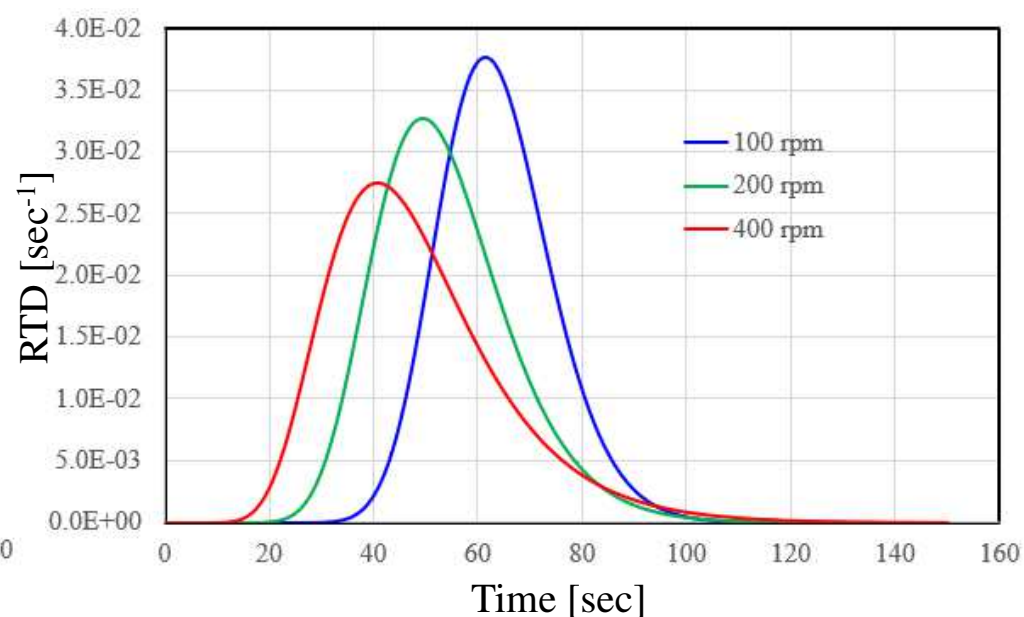


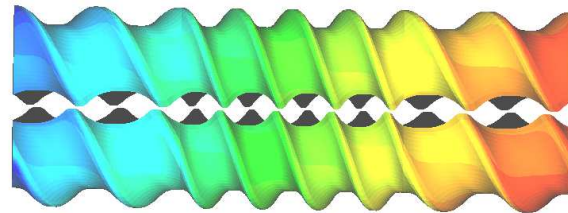
図10 滞留時間分布(RTD)予測結果の比較

表11 平均滞留時間と計算所要時間の比較

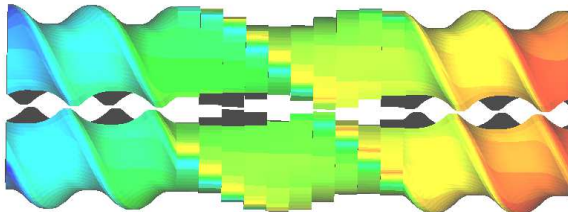
Case	Suminf res.: Vol / Q_{ex} [sec]	TSS output: $\sum_{i=1}^{300} t_i RTD(t_i) \Delta t$ [sec]	CPU time. [sec]
1	65.4	63.6	166
2	55.6	53.7	226
3	50.5	48.6	393

(Δt :0.5 sec, 300 cycle unsteady analysis)

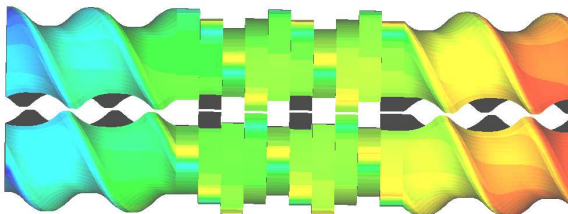
20 kg/h $\Rightarrow$
100 rpm
Full packed



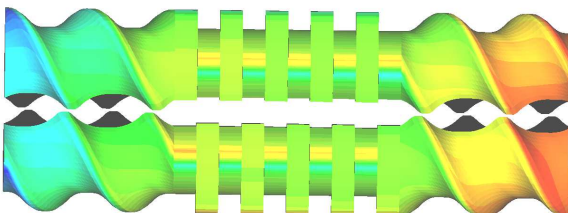
Standard Screw



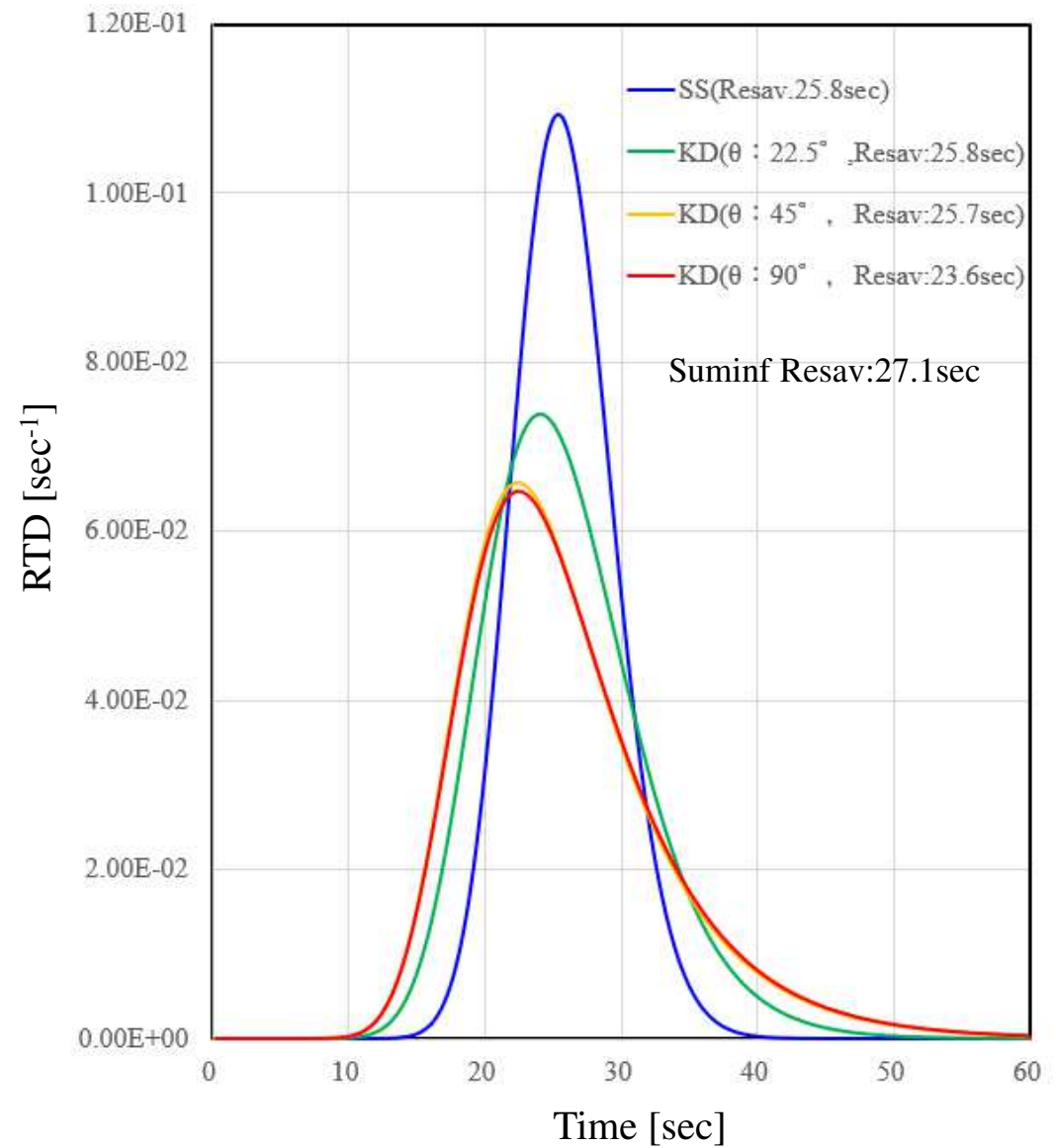
KD(θ :22.5°)



KD(θ :45°)

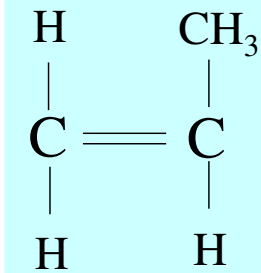


KD(θ :90°)

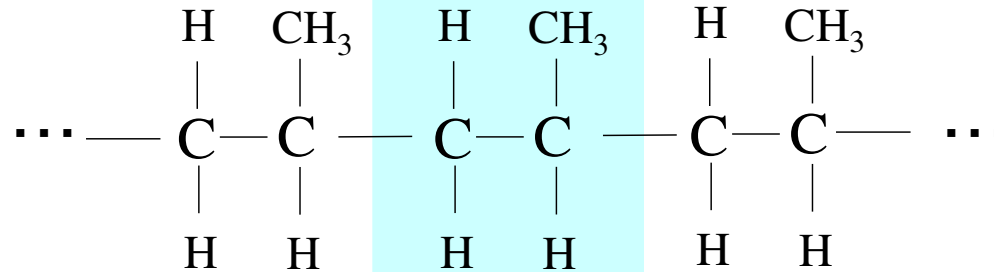


Application sample : 二軸スクリュ内における過酸化物によるポリプロピレンの分解反応解析

プロピレン
Propylene



ポリプロピレン
Polypropylene



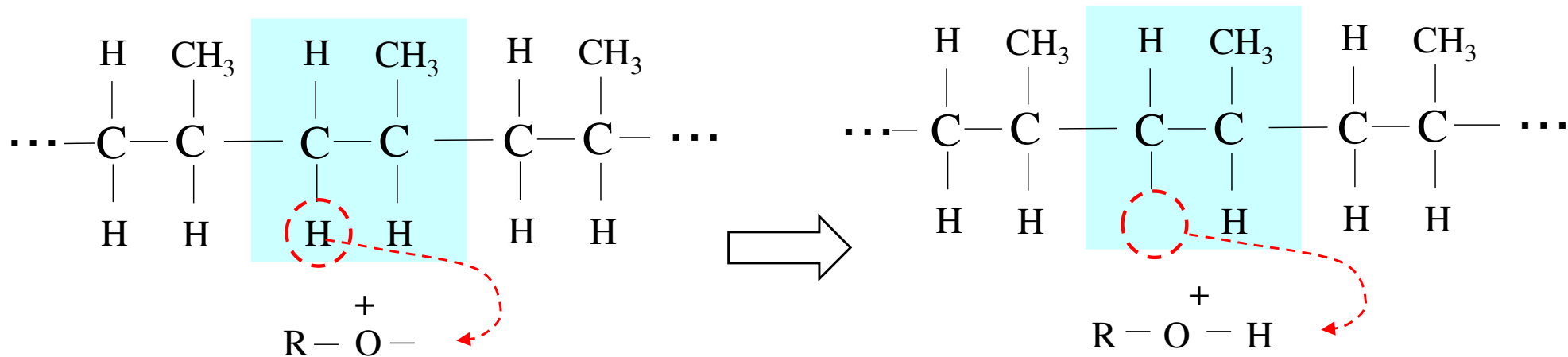
ペルオキシド
Peroxide



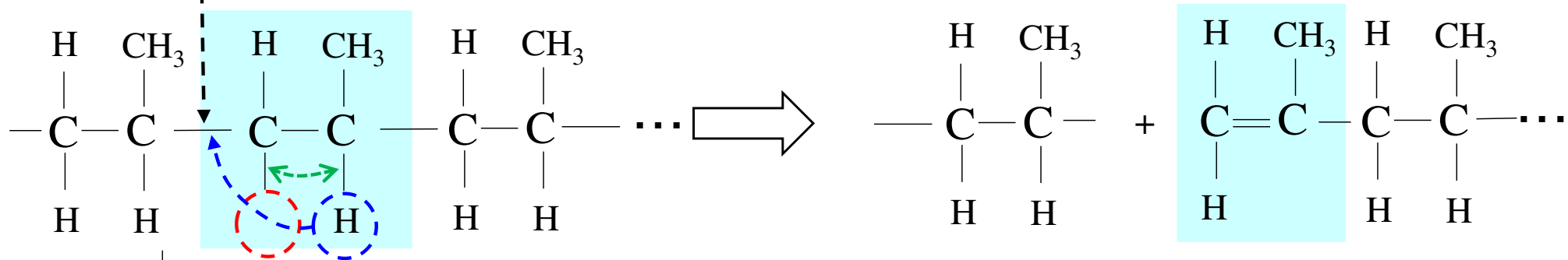
O-Oの単結合は非常に壊れやすい

フリーラジカル(遊離基)
Free radical

フリーラジカルによる水素原子の引き抜き



高分子鎖のβ切断



Transfer

Termination

Free radical reaction kinetic model ^{1),2)}

ペルオキシド(Peroxide)の濃度変化

$$\frac{D[I]}{Dt} = -\kappa_d [I]$$

ペルオキシドラジカル(Peroxide radical)の濃度変化

$$\frac{D[R^o]}{Dt} = 2fk_d [I] - \kappa_1 [R^o] \sum_{n=2}^{\infty} (n-1) [P_n]$$

ポリプロピレン高分子鎖(鎖数 n)の濃度変化

$$\frac{D[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - (n-1) [P_n] \right)$$

$[I]$: ペルオキシド濃度[mol/m³]

$[R^o]$: ラジカル濃度[mol/m³]

$[P_n]$: 鎖数 n の高分子濃度[mol/m³]

κ_d : ペルオキシド分解速度定数[s⁻¹]

κ_1 : 高分子鎖分解速度定数[m³/mol/s]

1) Suwanda, D., Lew, R. and Balke, S. T.: “Reactive extrusion of polypropylene I: Controlled degradation”, *J. Appl. Polym. Sci.* , **35**(4),1019-1032(1988)

2) Suwanda, D., Lew, R. and Balke, S. T.: “Reactive extrusion of polypropylene II: Degradation kinetic modeling”, *J. Appl. Polym. Sci.* , **35**(4),1033-1048(1988)

Closure moment method ³⁾

i番目のモーメント(i^{th} moment)[mol/m³]:

$$Q_i = \sum_{n=2}^{\infty} n^i [P_n]$$

数平均分子量(Number average molecular weight)[kg/mol]:

$$\bar{M}_n = m_0 \frac{Q_1}{Q_0}$$

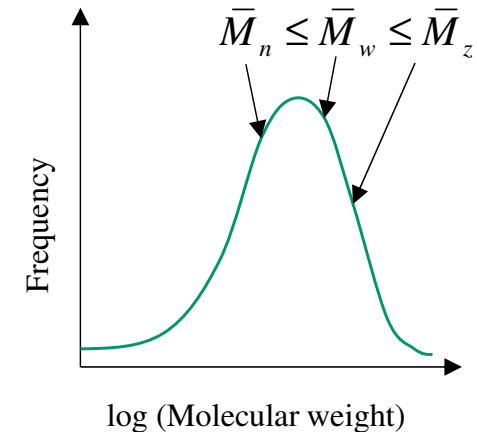
重量平均分子量(Weight average molecular weight)[kg/mol]:

$$\bar{M}_w = m_0 \frac{Q_2}{Q_1}$$

z平均分子量(z average molecular weight)[kg/mol]:

$$\bar{M}_z = m_0 \frac{Q_3}{Q_2}$$

MWD (Molecular Weight Distribution)



n : チェインの数

m_0 : 繰り返し単位の分子量

ポリプロピレンの場合, プロピレン
の分子量: $42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$

3) Tzoganakis, C., Vlachopoulos, J. and Hamielec A. E., "Production of Controlled-Rheology Polypropylene Resins by Peroxide Promoted Degradation During Extrusion", *Polym. Eng. Sci.*, **28**(3),170-180(1988)

モーメント方程式の導出

0-th moment: Q_0

$$\frac{D[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - (n-1)[P_n] \right)$$



$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{D[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - \sum_{n=2}^{\infty} (n-1)[P_n] \right)$$



$$\frac{DQ_0}{Dt} = \kappa_1 [R^o] (Q_1 - 3Q_0)$$

二重和公式:

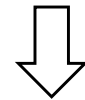
$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] &= \sum_{n=2}^{\infty} [P_{n+1} + P_{n+2} + P_{n+3} + \dots] \\ &= [P_3 + P_4 + P_5 + \dots] + [P_4 + P_5 + P_6 + \dots] + [P_5 + P_6 + P_7 + \dots] \\ &= \sum_{n=2}^{\infty} (n-2)[P_n] = Q_1 - 2Q_0 \end{aligned}$$

1-st moment: Q_1

$$\frac{D[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - (n-1)[P_n] \right)$$



$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{Dn[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{n=2}^{\infty} n \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)[P_n] \right)$$



二重和公式:

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} n \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] &= \sum_{n=2}^{\infty} [nP_{n+1} + nP_{n+2} + nP_{n+3} + \dots] \\ &= [2P_3 + 2P_4 + 2P_5 + 2P_6 \dots] + [3P_4 + 3P_5 + 3P_6 + 3P_7 \dots] + [4P_5 + 4P_6 + 4P_7 \dots] \\ &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{n^2 - n - 2}{2} [P_n] = \frac{1}{2} Q_2 - \frac{1}{2} Q_1 - Q_0 \end{aligned}$$

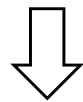
$$\frac{DQ_1}{Dt} = -2\kappa_1 [R^o] Q_0$$

2-nd moment: Q_2

$$\frac{D[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - (n-1)[P_n] \right)$$



$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{Dn^2[P_n]}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(2 \sum_{n=2}^{\infty} n^2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] - \sum_{n=2}^{\infty} n^2 (n-1) [P_n] \right)$$



$$\frac{DQ_2}{Dt} = \kappa_1 [R^o] \left(-\frac{1}{3} Q_3 + \frac{1}{3} Q_1 - 2Q_0 \right)$$

二重和公式:

$$\begin{aligned} \sum_{n=2}^{\infty} n^2 \sum_{i=n+1}^{\infty} [P_i] &= \sum_{n=2}^{\infty} [n^2 P_{n+1} + n^2 P_{n+2} + n^2 P_{n+3} + \dots] \\ &= [4P_3 + 4P_4 + 4P_5 + 4P_6 \dots] + [9P_4 + 9P_5 + 9P_6 + 9P_7 \dots] + [16P_5 + 16P_6 + 16P_7 + \dots] \\ &= \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{(n-2)(n-1)(2n-3)}{6} + (n-2)(n-1) + (n-2) \right) [P_n] \\ &= \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{2n^3 - 3n^2 + n - 6}{6} \right) [P_n] \end{aligned}$$

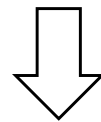
Closure relation⁴⁾

$$Q_3 = \frac{2Q_2}{Q_1 Q_0} (2Q_2 Q_0 - Q_1^2)$$

4) Hulburt, H. M. and Katz, S. "Some Problems in Particle Technology : A Statistical Mechanical Formulation", *Chem. Eng. Sci.* , **19**,555-574(1964)

ペルオキシドラジカル (Peroxide radical) の濃度変化

$$\begin{aligned}\frac{D[R^o]}{Dt} &= 2fk_d[I] - \kappa_1[R^o] \sum_{n=2}^{\infty} (n-1)[P_n] \\ &= 2fk_d[I] - \kappa_1[R^o](Q_1 - Q_0)\end{aligned}$$



Steady state approximation

$$\begin{aligned}2fk_d[I] - \kappa_1[R^o](Q_1 - Q_0) &= 0 \\ \therefore Q_1 - Q_0 &\gg 1\end{aligned}$$

PPの分解プロセスを表現する化学反応モデル

ペルオキシド(Peroxide)の濃度変化

$$\frac{D[I]}{Dt} = -\kappa_d [I]$$

モーメント方程式

$$\frac{DQ_0}{Dt} = 2f\kappa_d [I] \left(\frac{Q_1 - 3Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

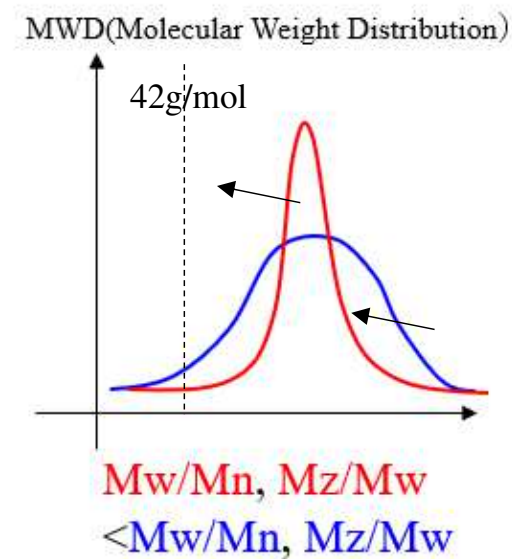
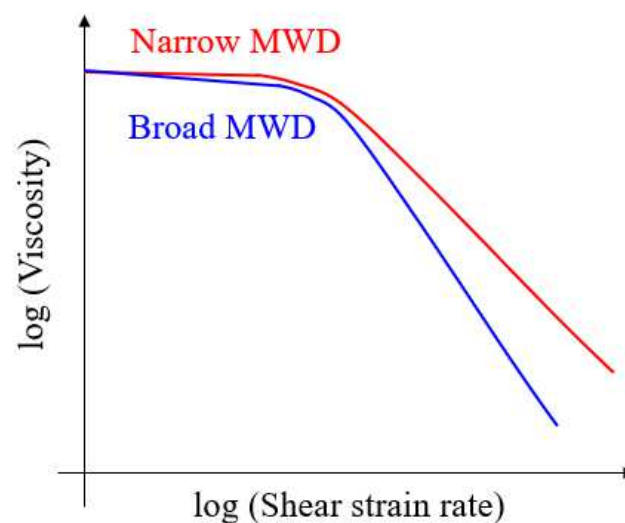
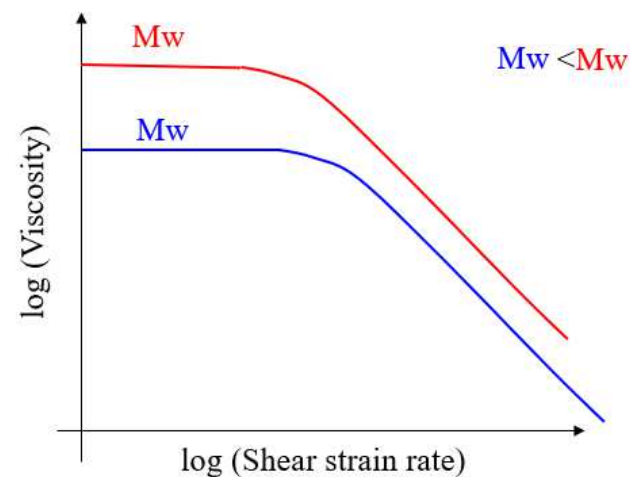
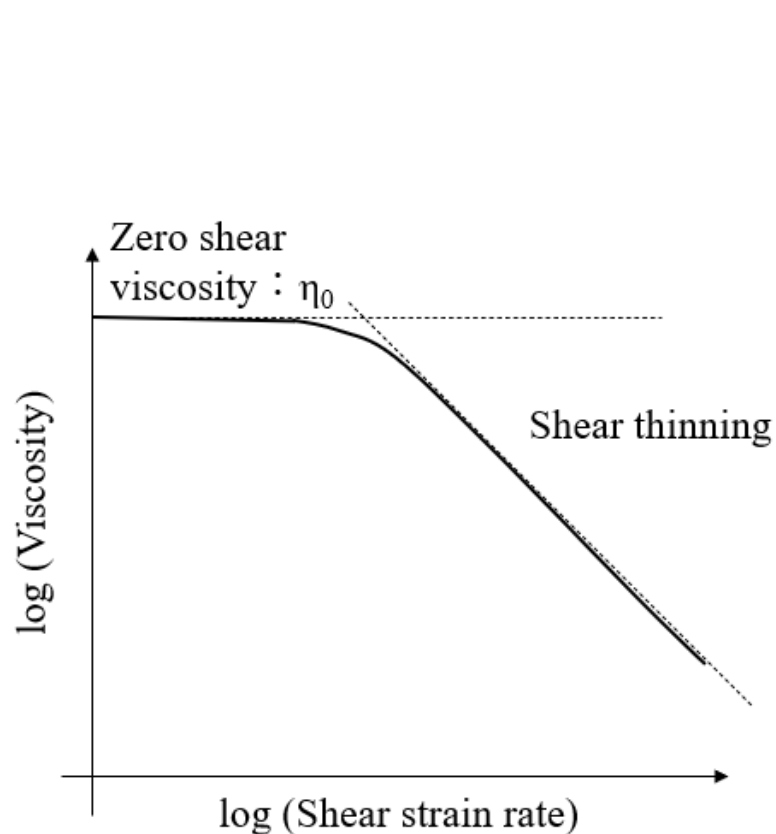
$$\frac{DQ_1}{Dt} = -2f\kappa_d [I] \left(\frac{Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

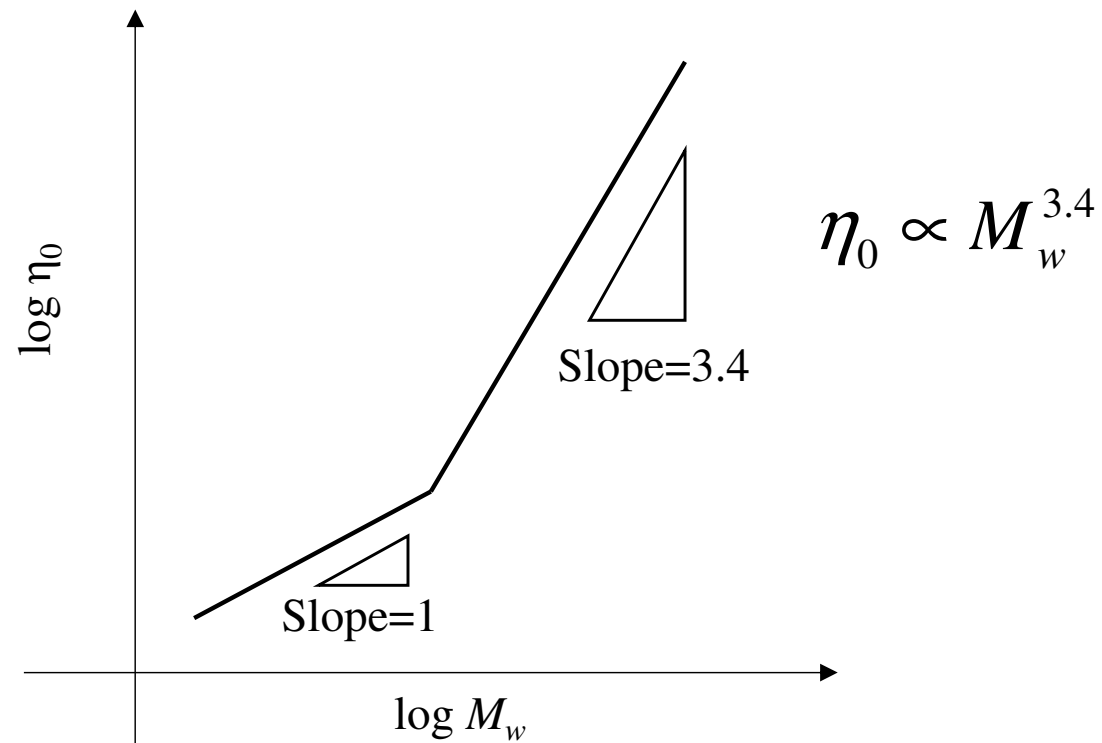
$$\frac{DQ_2}{Dt} = 2f\kappa_d [I] \left(\frac{-\frac{1}{3}Q_3 + \frac{1}{3}Q_1 - 2Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$Q_3 = \frac{2Q_2}{Q_1 Q_0} (2Q_2 Q_0 - Q_1^2)$$

f : Initiator efficiency
(0.6~1)

粘度と各種平均分子量との関係





5) Fox, T. G. and Flory, P. J. ,” Viscosity—Molecular Weight and Viscosity—Temperature Relationships for Polystyrene and Polyisobutylene“, *J. Am. Chem. Soc.* ,**70**,2384-2395(1948)

Modified Cross model⁶⁾

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + C(\eta_0 \dot{\gamma})^{1-n}},$$

$$\eta_0 = B \exp\left(\frac{T}{T_0}\right),$$

$$B = k_1 \bar{M}_w^{3.7},$$

$$C = k_2 \frac{\bar{M}_z}{\bar{M}_w}$$

非噛合型異方向回転二軸スクリュの
2D FAN法を利用した等温完全充満
部分領域の解析

6) Fukuoka, T. and Min, K. , “Flow Analysis a Reactive Processing in a Twin Screw Extruder”, *Seikei-Kakou*, **7**(8),521—528(1995)

解析モデル

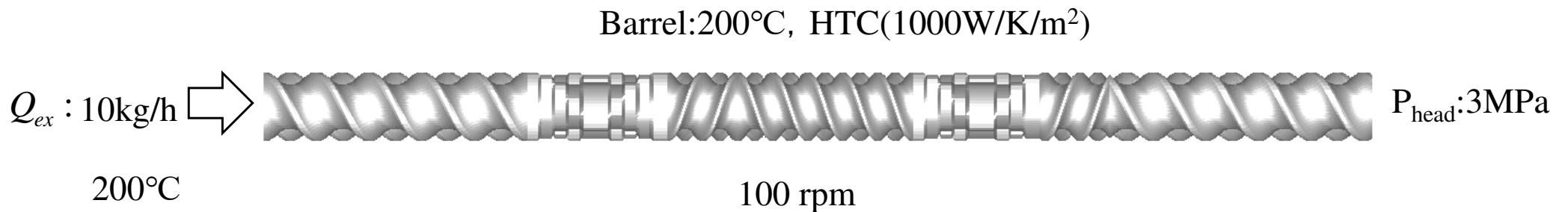


表12 ケーススタディ条件

Case	Thermal condition for chemical model	Viscous model
1	Isothermal (200°C)	Cross
2	Non-isothermal	Cross
3	Non-isothermal	Modified Cross ⁶⁾

u : 流動情報
 T : 温度情報
 C : 化学成分情報
 η : 粘度情報

$u \rightarrow C, T=200^\circ\text{C}$
 $u, T \rightarrow C$
 $u, T \rightarrow C$
 $\eta(\dot{\gamma}, T, C)$

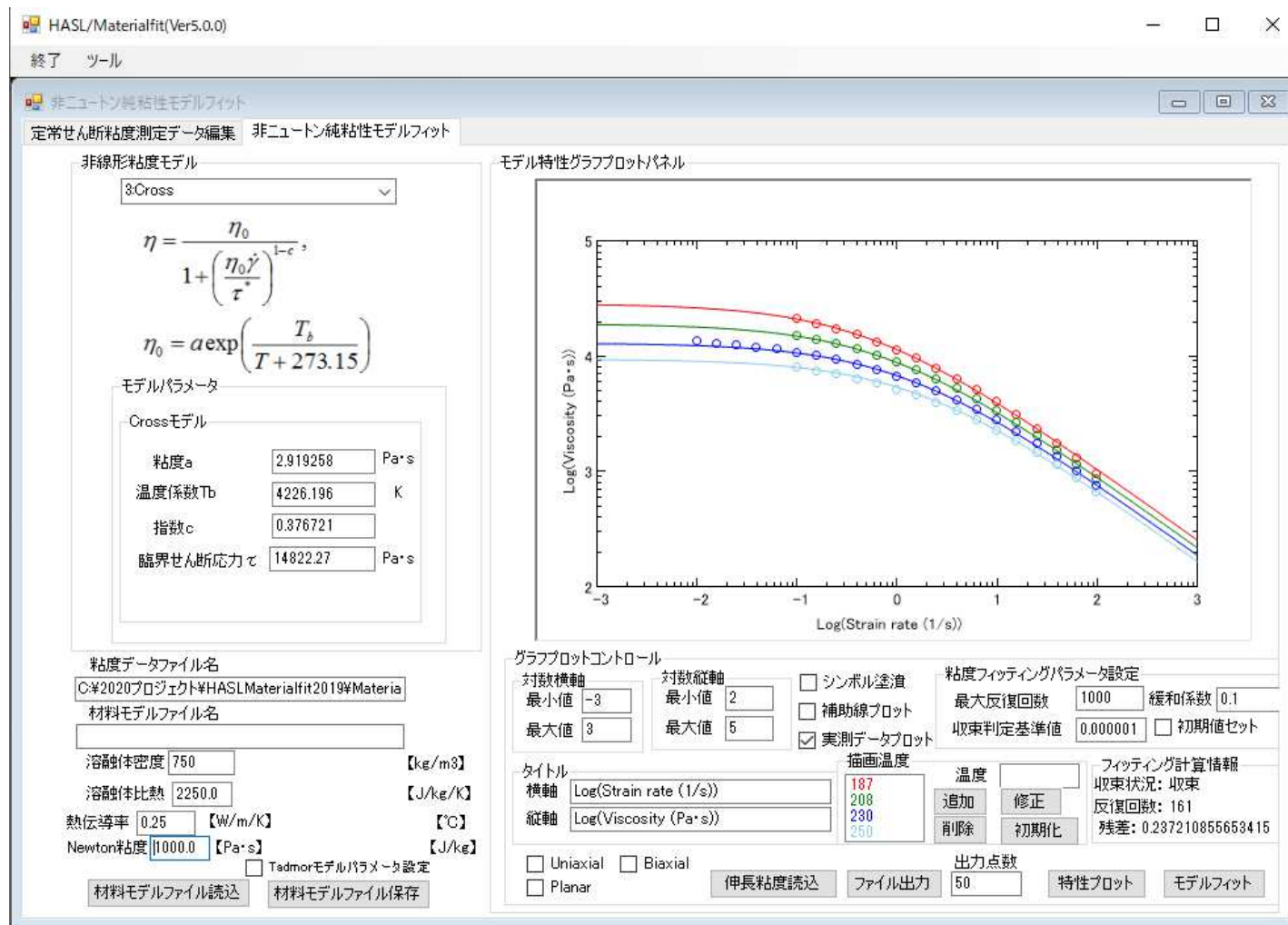


図11 フローカーブのCross モデルフィット (Material fit data base, PP_D3)

解析条件

入力基本情報

$$\rho : 750 \text{ kg/m}^3$$

$$\bar{M}_n : 74400 \text{ kg/mol}$$

$$\bar{M}_w : 356000 \text{ kg/mol}$$

$$\bar{M}_z : 1176000 \text{ kg/mol}$$



各種モーメント流入境界値

$$Q_0 = \frac{\rho}{\bar{M}_n} = \frac{750 \text{ kg/m}^3}{74400 \text{ kg/mol}} = 0.010 \text{ mol/m}^3$$

$$Q_1 = \frac{\rho}{m_0} = \frac{750 \text{ kg/m}^3}{42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}} = 1.7857 \times 10^4 \text{ mol/m}^3$$

$$Q_2 = \frac{\bar{M}_w Q_1}{m_0} = \frac{356000 \text{ kg/mol} \times 1.7857 \times 10^4 \text{ mol/m}^3}{42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}} = 1.5136 \times 10^{11} \text{ mol/m}^3$$

$$Q_3 = \frac{\bar{M}_z Q_2}{m_0} = \frac{1176000 \text{ kg/mol} \times 1.5136 \times 10^{11} \text{ mol/m}^3}{42 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}} = 4.2381 \times 10^{18} \text{ mol/m}^3$$

ペルオキシド流入境界値

$$[I_0]: 1000 \text{ ppm} = 10^{-3} \text{ mol/m}^3$$

$$\text{分解速度定数} [s^{-1}] \quad k_d = 1.98 \times 10^{12} \exp \left(-\frac{1.49 \times 10^4}{T + 273.15} \right)$$

$$\text{Initiator efficiency} [-] \quad f = 1.0$$

計算条件

非ニュートン反復計算数: 10

化学反応成分: 4 種

化学反応モデル反復計算数: 10

化学反応モデル緩和係数: 1.0

計算時間: 918 sec

Intel® Core™ i7-9700

CPU @3.00 GHz

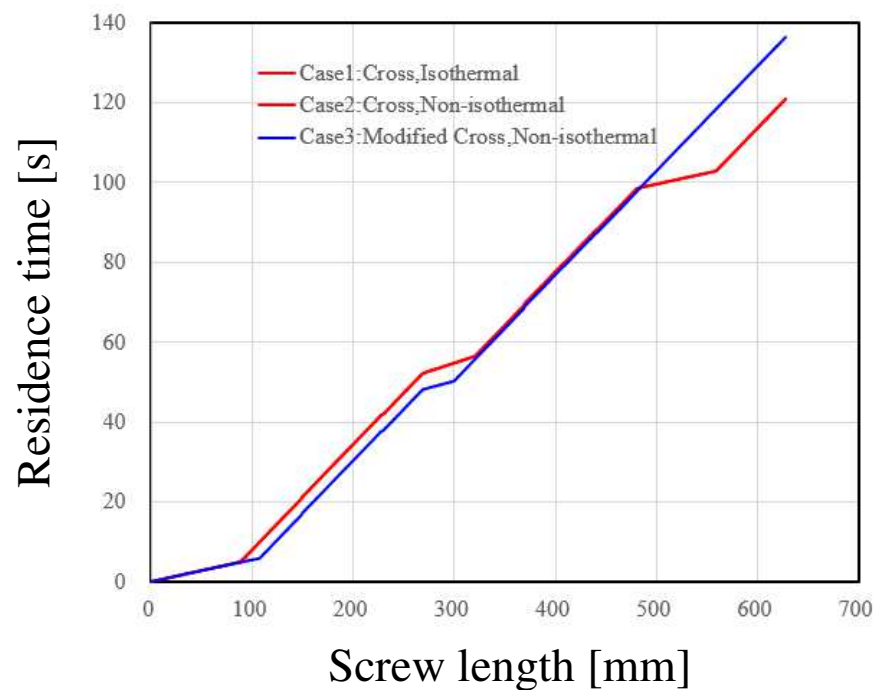


図12 滞在時間分布予測結果の比較

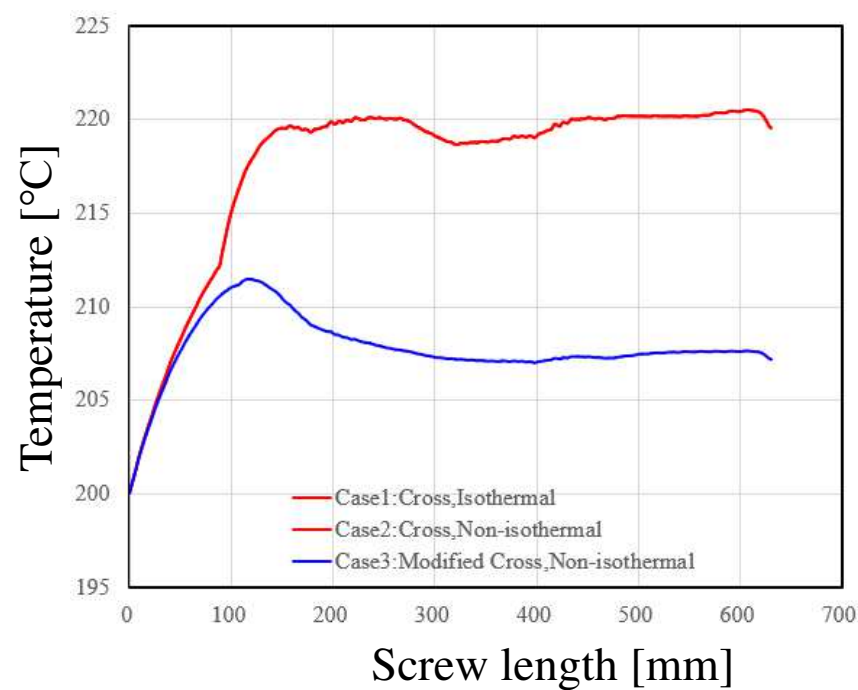


図13 温度分布予測結果の比較

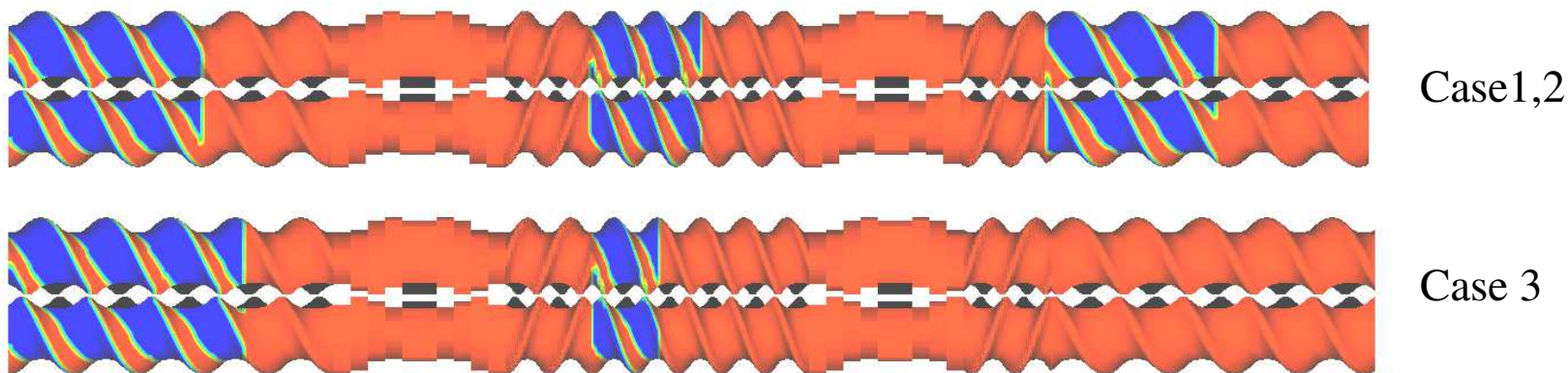


図14 充満率分布予測結果の比較

Pressure Distribution (MPa)

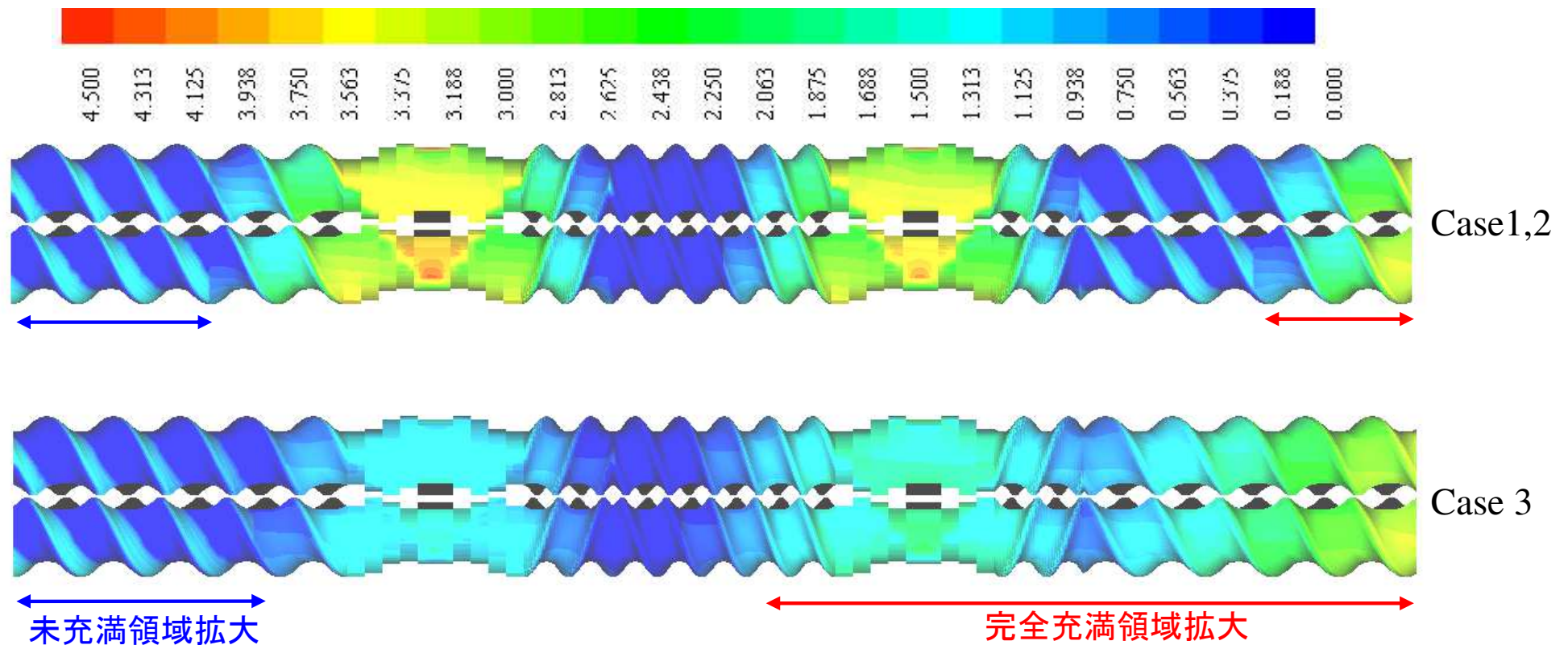
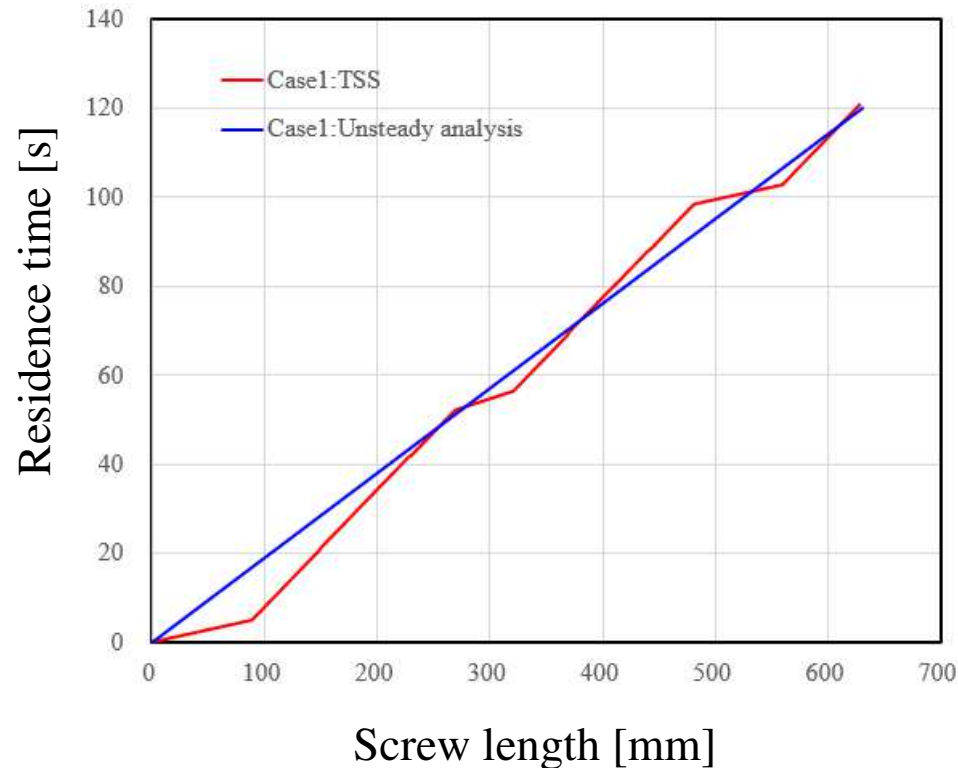


図15 圧力分布予測結果の比較

部分充满領域の充满率は、粘度には依存せず、押出量と回転を一定とした場合、変化しない。しかし、未充满領域の押出方方向への分布状態は、粘度に依存して変化する。Case3では、PPの分解に伴う粘度低下が考慮されているため、下流側では先端背圧3MPaの抵抗の影響がCase1,2と比較して高まるため、完全充满状態の領域が拡大する。逆に上流側では、隣接する完全充满領域の圧力が低下するため、その上流側の未充满領域が拡大する。

化学反応解析結果の妥当性についての検討



TSSモデルの軸方向分割数:537分割
(周方向76分割, 要素数:40812)

Unsteady analysis condition :
 $\Delta t=0.01s$, 12000 cycles

TSS:

Steady analysis systems of partial differential equations

Unsteady analysis of systems of ordinary differential equations

$$\frac{d[I]}{dt} = -\kappa_d [I]$$

$$\frac{dQ_0}{dt} = 2f\kappa_d [I] \left(\frac{Q_1 - 3Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$\frac{dQ_1}{dt} = -2f\kappa_d [I] \left(\frac{Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$\frac{dQ_2}{dt} = 2f\kappa_d [I] \left(\frac{-\frac{1}{3}Q_3 + \frac{1}{3}Q_1 - 2Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$Q_3 = \frac{2Q_2}{Q_1 Q_0} (2Q_2 Q_0 - Q_1^2)$$

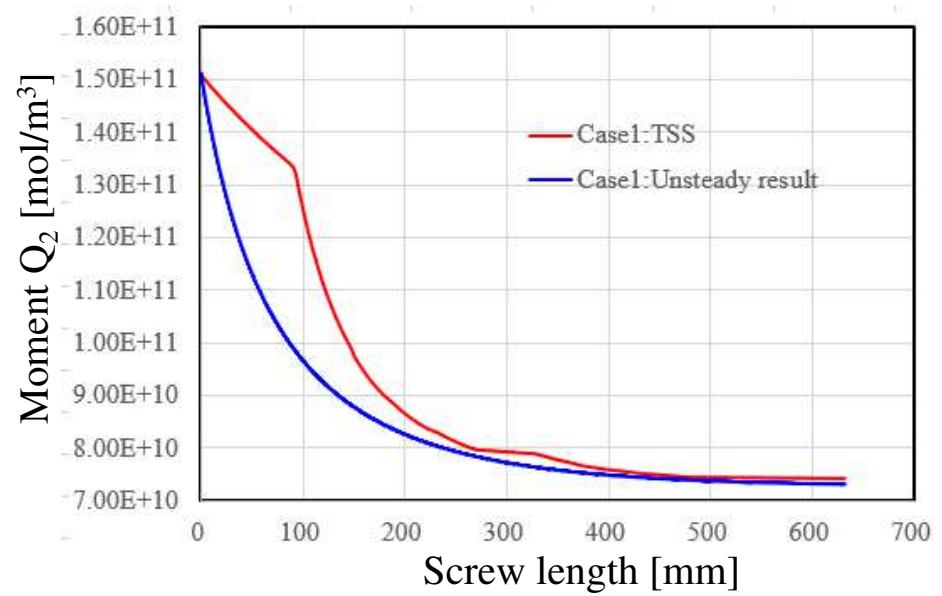
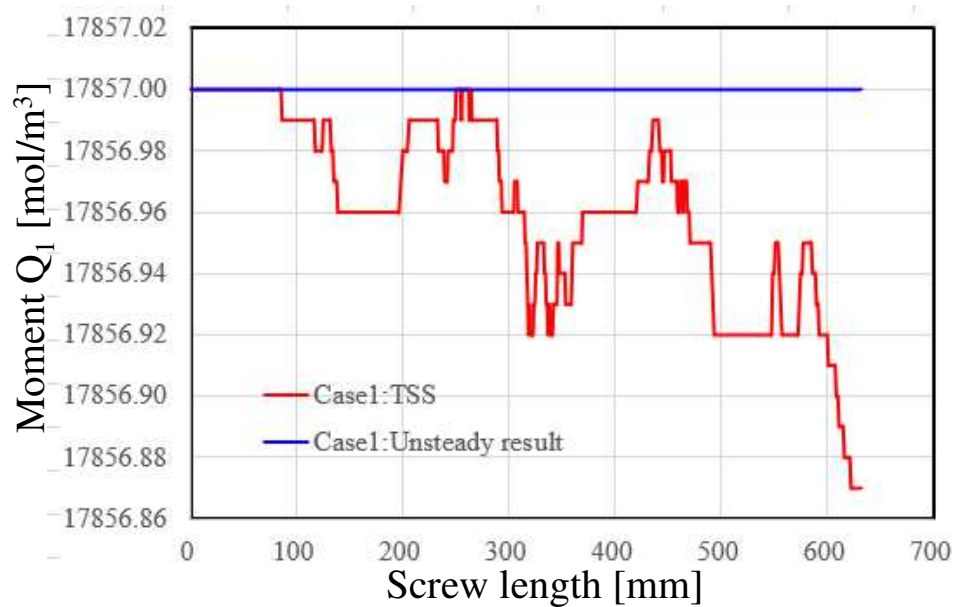
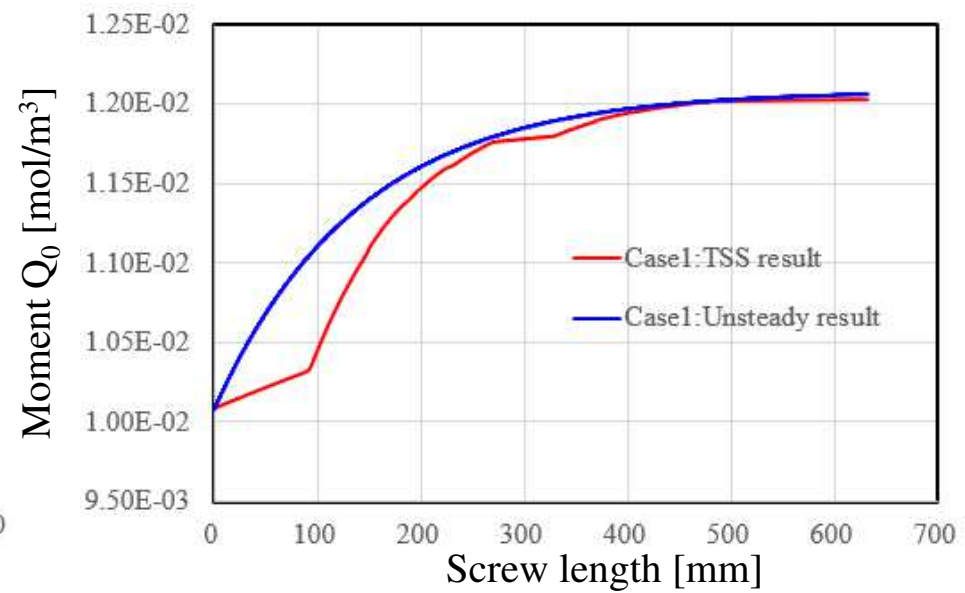
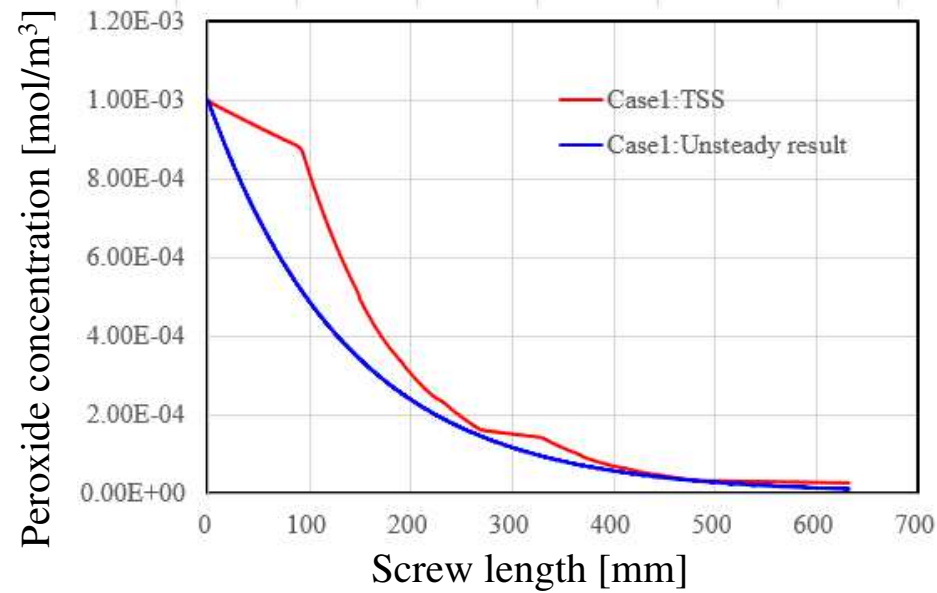


図16 TSS解析結果と非線形連立常微分方程式の非定常解析結果の比較

妥当性検討結果

TSSを利用した定常非線形連立偏微分
方程式の反復計算結果

$\approx$

非定常非線形連立常微分方程式の
非定常解析結果

化学種の濃度分布に観られる乖離は、滞在時間の表現の差に起因
: TSS; 未充满部 Δt 短, 充满部 Δt 長, 非定常解析結果; $\Delta t=0.01$ s一定

当化学反応モデルでは、1次モーメント Q_1 は殆ど変化しない.

$$\begin{aligned} Q_1 &= 17857 \text{ [mol/m}^3\text{]} \\ &\downarrow \\ m_0 Q_1 &= m_0 \sum_{n=2}^{\infty} n [P_n] = \rho \\ m_0 &: 42 \times 10^{-3} \text{ [kg/mol]} \\ &\downarrow \\ \rho &= 750 \text{ [kg/m}^3\text{]} \end{aligned}$$

PPの分解に伴って粘度は変化するが、密度は殆ど変化しない:
非圧縮粘性流体としてのモデル化が妥当

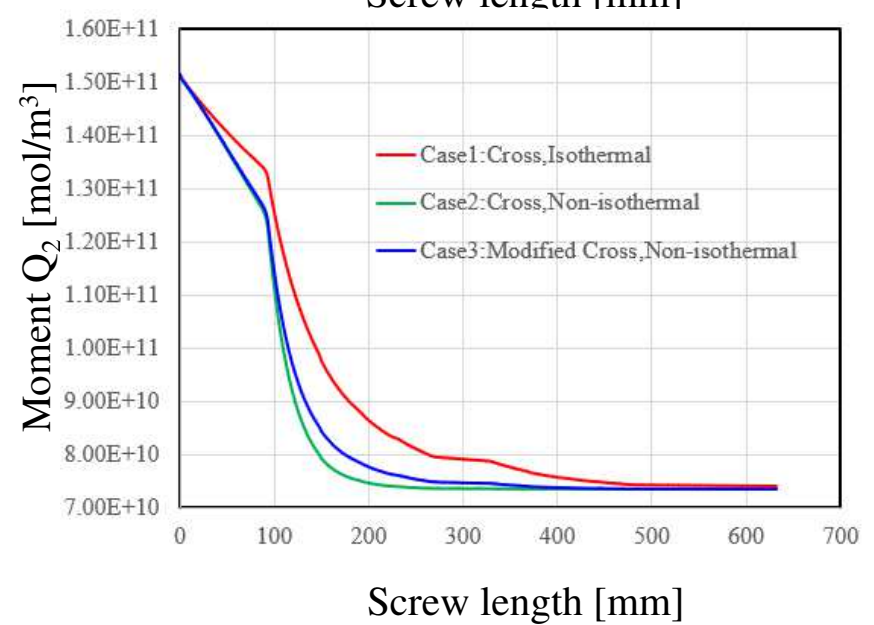
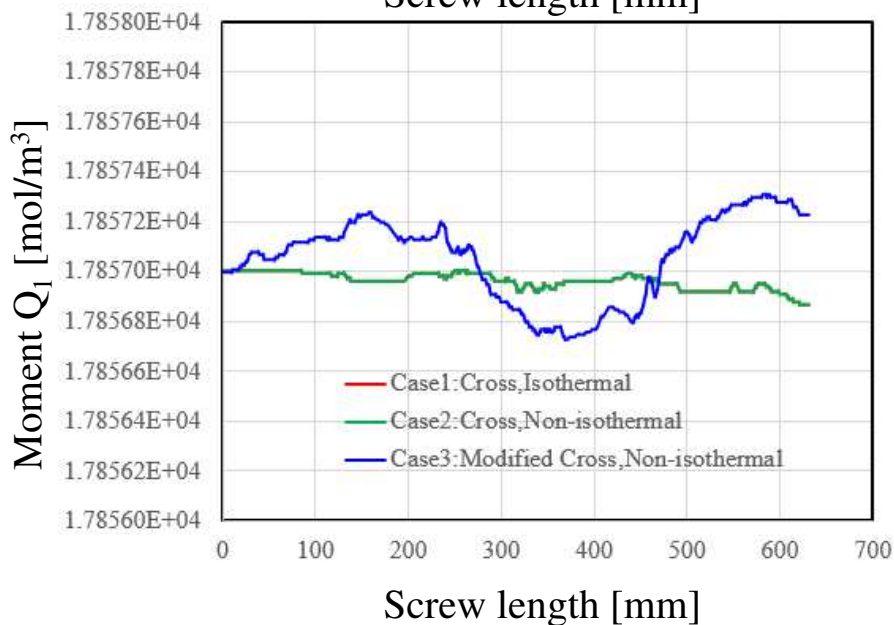
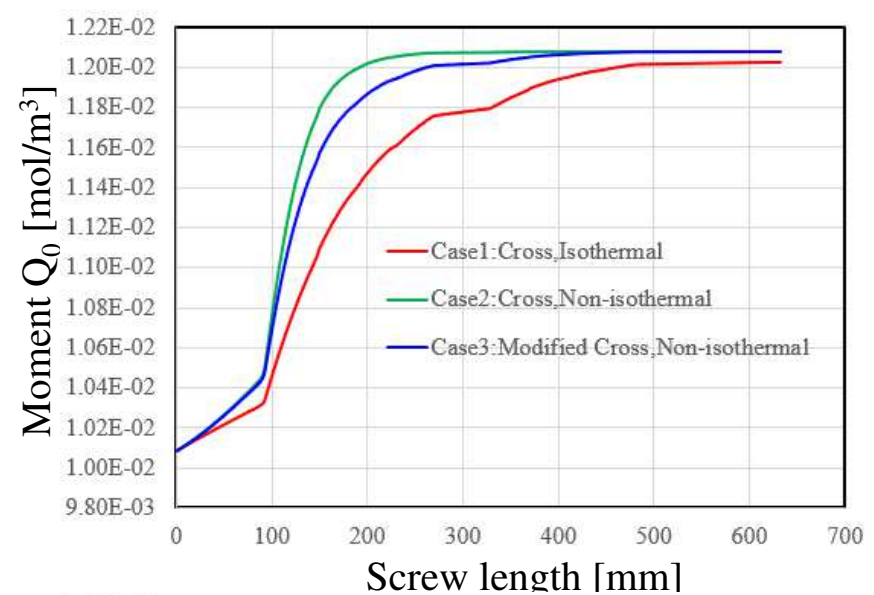
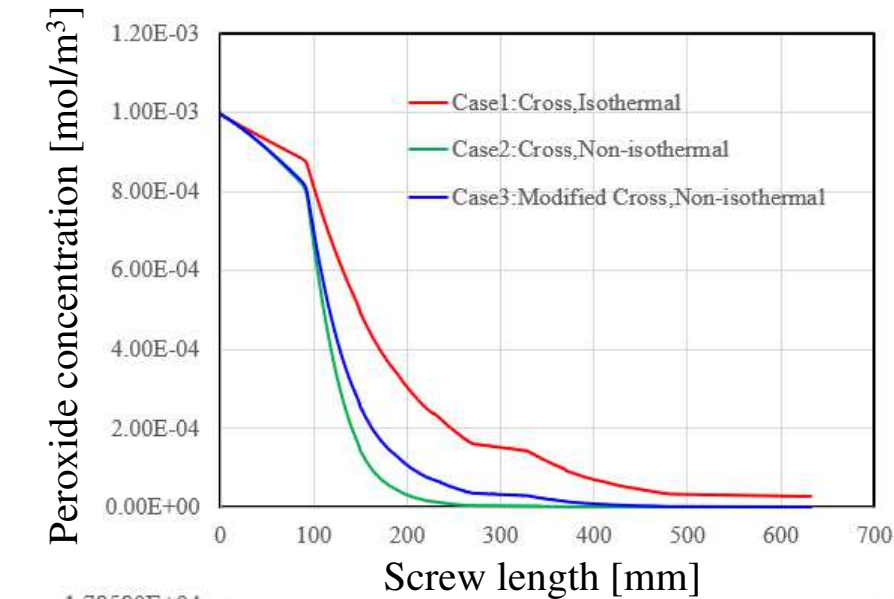


図17 ペルオキサイド濃度と各種モーメントの予測結果の比較

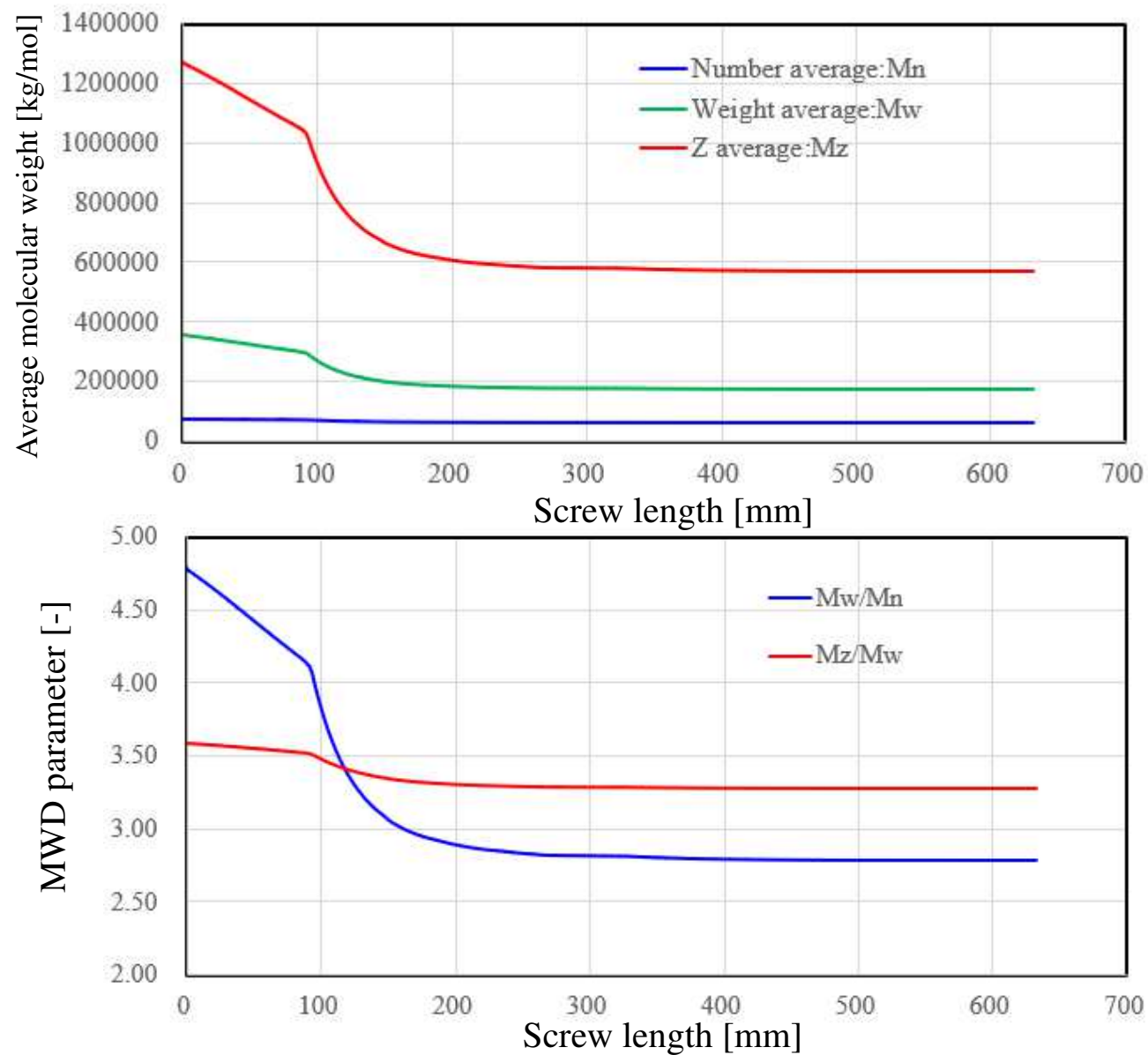
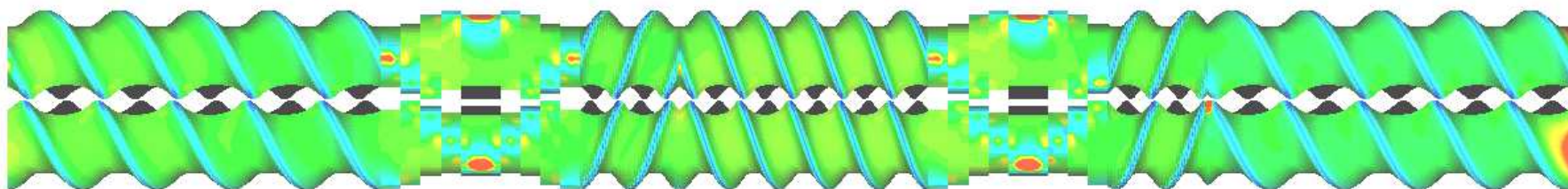


図18 各種平均分子量とMWDパラメータの予測結果(Case 3)

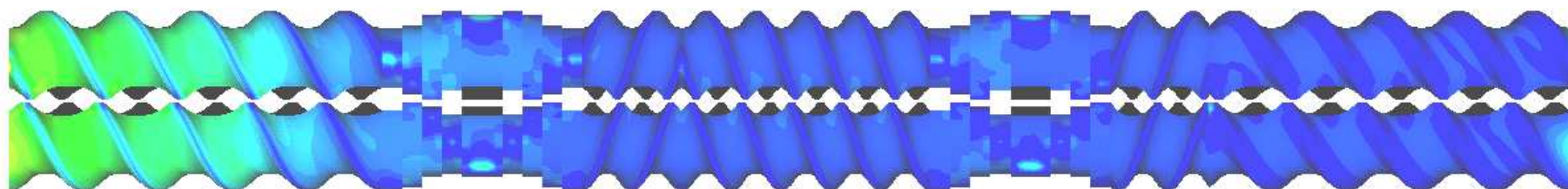
Viscosity(Pa·s)



1070.000
965.667
933.333
901.000
868.667
836.333
804.000
771.667
739.333
707.000
674.667
642.333
610.000
577.667
545.333
513.000
480.667
448.333
416.000
383.667
351.333
319.000
286.667
254.333
222.000



Case2 : Cross model



Case3 : Modified Cross model

図19 粘度分布予測結果の比較

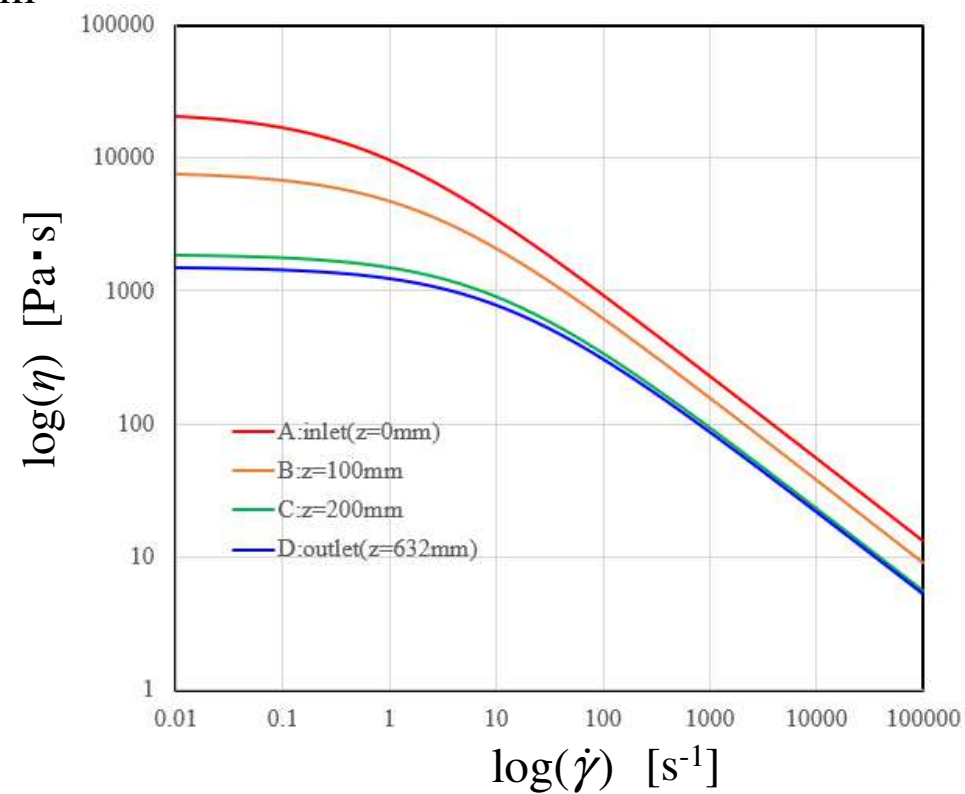
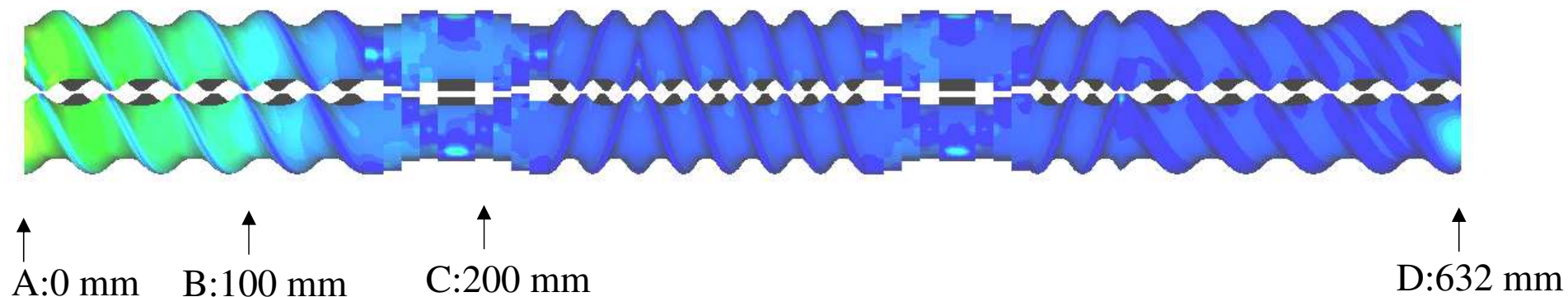


図20 スクリュ内各所でのフローカーブ予測結果(Case 3, 200°C)

ユーザ定義ルーチン

Initialsetforchemのユーザ定義部

```
double precision dio,q0o,q1o,q2o,q3o,dm0
C
C+++++
C+   User define variable number
C+++++
C
C   Number of chemical species
C
chemnumber=4
C
C   Number of chemical variable
C
chemvnumber=6
C
C   Number of common variable
C
commonvnumber=2
C
C+++++
```

当ルーチン内で利用する変数の型宣言

```
C+++++
C   User define Initial/Boundary condition set
C+++++
dio=1.0d-03
q0o=1.0081d-02
q1o=1.7857d+04
q2o=1.5136d+11
q3o=2.0*q2o*(2.0*q2o*q0o-q1o**2.0)/q1o/q0o
dm0=4.2D-02
```

化学反応計算の初期値
(境界値)設定

```
C
C   chemname(1)='Peroxide (moles/kg)',
C   chemname(2)='Q0 (moles/m3)',
C   chemname(3)='Q1 (moles/m3)',
C   chemname(4)='Q2 (moles/m3)',
C
C   chemvname(1)='Q3 (moles/m3)',
C   chemvname(2)='Mn (kg/m3)',
C   chemvname(3)='Mw (kg/m3)',
C   chemvname(4)='Mz (kg/m3)',
C   chemvname(5)='Mw/Mn (-)',
C   chemvname(6)='Mz/Mw (-)',
C
C   dmn=dm0*q1o/q0o
C   dmw=dm0*q2o/q1o
C   dmz=dm0*q3o/q2o
C
C   commonvpar(1)=dmw
C   commonvpar(2)=dmz/dmw
C
```

解析対象とする移流
方程式の数=4

代数的関係式の数=6

コモン変数の数=2

ポスト項目の
見出し

各種平均分子量の初期値設定

Viscalと共用する変数定義

```

c      do ie=1,nelem(1)
c
chemc(1,ie)=dio
chemc(2,ie)=q0o
chemc(3,ie)=q1o
chemc(4,ie)=q2o

```

化学種要素変数の初期設定

```

c
chempar(1,ie)=q3o
chempar(2,ie)=dmn
chempar(3,ie)=dmw
chempar(4,ie)=dmz
chempar(5,ie)=chempar(3,ie)/chempar(2,ie)
chempar(6,ie)=chempar(4,ie)/chempar(3,ie)
end do

```

```

c
do in=1,nnode(1)
chemcn(1,in)=dio
chemcn(2,in)=q0o
chemcn(3,in)=q1o
chemcn(4,in)=q2o

```

化学種節点変数の初期設定

```

c
chemparn(1,in)=q3o
chemparn(2,in)=dm0*q1o/q0o
chemparn(3,in)=dm0*q2o/q1o
chemparn(4,in)=dm0*q3o/q2o
chemparn(5,in)=chemparn(3,in)/chemparn(2,in)
chemparn(6,in)=chemparn(4,in)/chemparn(3,in)
c
end do

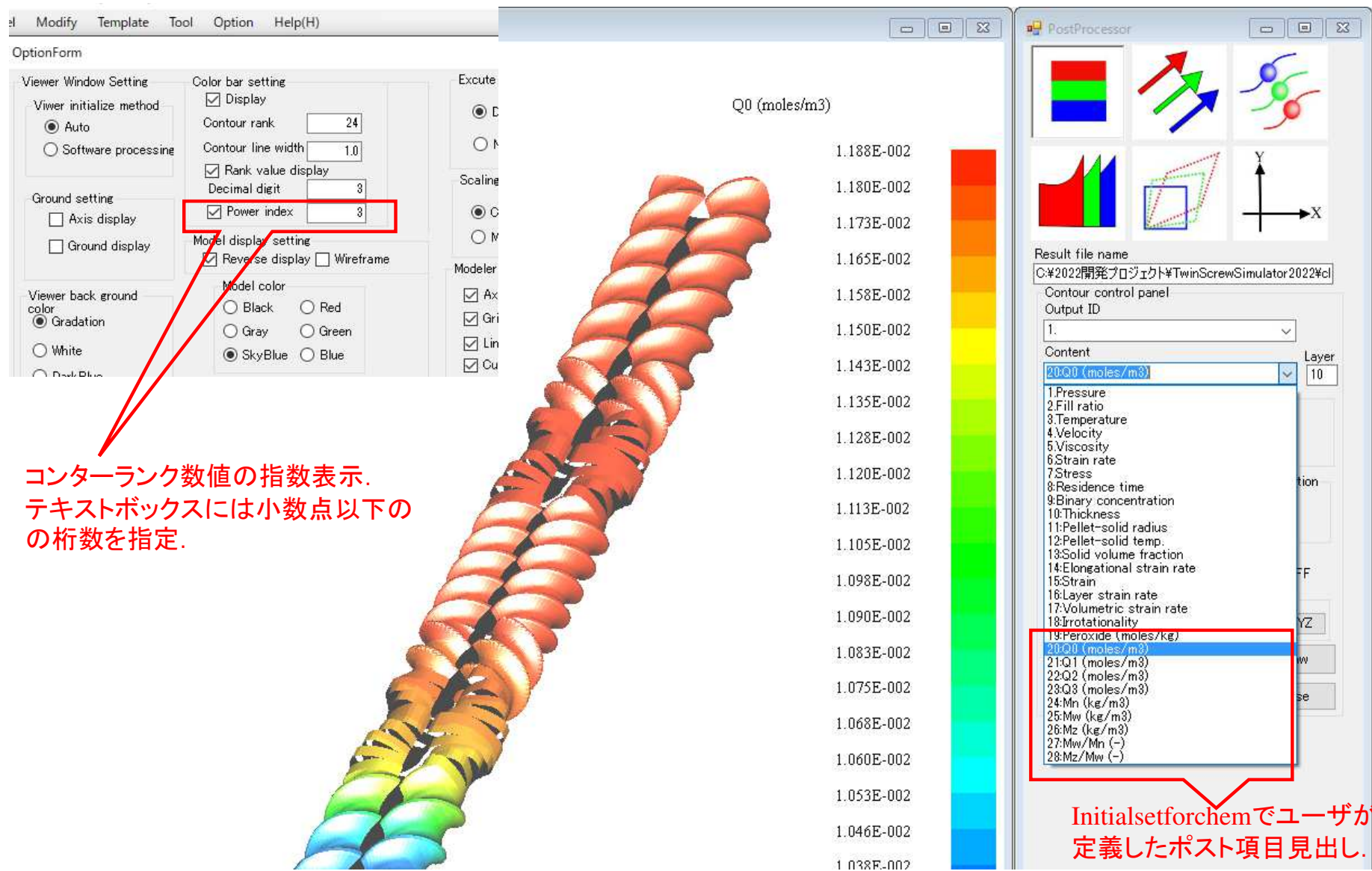
```

```

c      do ii=1,iinletnoderum
chemcn(1,ii)=dio
chemcn(2,ii)=q0o
chemcn(3,ii)=q1o
chemcn(4,ii)=q2o
end do
c+++++

```

流入口(in=1~iinletnoderum)に
濃度境界値を設定



コンターランク数値の指数表示.
テキストボックスには小数点以下の桁数を指定.

Initialsetforchemでユーザが定義したポスト項目見出し.

chemfscalの内容

```

subroutine chemfscal
use dalloc
include 'incfil.inc'

c
double precision dk0,actv,dkd,th
fc=1.0
corg te=200.0+273.15
dk0=1.98d+012
actv=1.4947d+04
corg dkd=dk0*dexp(-actv/te)
c
do ie=1,nelem(1)
c
te=tempe(ie,1)+273.15
dkd=dk0*dexp(-actv/te)
c
Peroxide implicit difference
chemf(1,ie)=dkd
chems(1,ie)=0.0
th=2.0*fc*dkd*chemc(1,ie)
c
Moment q0,q1,q2 explicit difference
q0
chemf(2,ie)=0.0
chems(2,ie)=th*(chemc(3,ie)-3.0*chemc(2,ie))
& / (chemc(3,ie)-chemc(2,ie))
q1
chemf(3,ie)=0.0
chems(3,ie)=-2.0*th*chemc(2,ie)
& / (chemc(3,ie)-chemc(2,ie))
q2
chemf(4,ie)=0.0
chems(4,ie)=th*(-chempar(1,ie)/3.0
& +chemc(3,ie)/3.0-2.0*chemc(2,ie))
& / (chemc(3,ie)-chemc(2,ie))
end do
return
stop
end

```

← 当ルーチン内で利用する変数の型宣言

← Initiator efficiency

ペルオキシド分解速度定数
パラメータ

ペルオキシド分解速度定数の計算
tempe(ie,1):要素ieの温度

← $\frac{D[I]}{Dt} = -\kappa_d [I] \Rightarrow \left(\kappa_d + \frac{D}{Dt} \right) [I] = 0$

TSSが解析対象とする移流方程式:

$$\left(chemf(ic,ie) + \frac{D}{Dt} \right) f(ic,ie) = chems(ic,ie)$$

変数対応関係

$[I]$: chemc(1,ie)

Q_0 : chemc(2,ie)

Q_1 : chemc(3,ie)

Q_2 : chemc(4,ie)

$$\frac{DQ_0}{Dt} = 2f\kappa_d[I] \left(\frac{Q_1 - 3Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$\frac{DQ_1}{Dt} = -2f\kappa_d[I] \left(\frac{Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

$$\frac{DQ_2}{Dt} = 2f\kappa_d[I] \left(\frac{-\frac{1}{3}Q_3 + \frac{1}{3}Q_1 - 2Q_0}{Q_1 - Q_0} \right)$$

chemvariableの内容

```
subroutine chemvariable
  use dalloc
  include 'incfil.inc'
  double precision q0o,q1o,q2o,dm0  ← 当ルーチン内で利用する変数の型宣言
c
c  dm0=4.2D-02  ← プロピレンの分子量:4.2D-02 kg/m³
c
c  do ie=1,nelem(1)
c
c    q0o=chemc(2,ie)
c    q1o=chemc(3,ie)
c    q2o=chemc(4,ie)
c
c  Closure relation
c
c  q3o=2.0*q2o*(2.0*q2o*q0o-q1o**2.0)/q1o/q0o ← Closure relation
c
c  chempar(1,ie)=q3o
c  chempar(2,ie)=dm0*q1o/q0o
c  chempar(3,ie)=dm0*q2o/q1o
c  chempar(4,ie)=dm0*q3o/q2o
c  chempar(5,ie)=chempar(3,ie)/chempar(2,ie)
c  chempar(6,ie)=chempar(4,ie)/chempar(3,ie)
c
c  end do
c
c  return
c  stop
c  end
```

変数対応関係

Chempar(1,ie) : Q_3

Chempar(2,ie) : 数平均分子量 M_n

Chempar(3,ie) : 重量平均分子量 M_w

Chempar(4,ie) : Z平均分子量 M_z

Chempar(5,ie) : M_w/M_n

Chempar(6,ie) : M_z/M_w

viscalの内容

nonnew : 非ニュートン識別番号

1:Newtonian

2:Power law

3:Log polynomial

4:Carreau

5:Carreau Yasuda

6:Cross

```
C
C*** (6) Cross Model
```

```
C
C   if(nonnew.eq.6) then
```

```
C
C   eta0=bcoef*exp(tref/(temhi+273.15))
```

$$\eta_0 = a \exp\left(\frac{T_b}{T + 273.15}\right)$$

```
C
C   Molecular weight average eta0 shift proposed by Fukuoka & Min
```

```
C
C   eta0=(chempar(3,ie)/commonvpar(1))*3.7*eta0
```

$a \rightarrow$ bcoef (Material fit パラメータ),
 $T_b \rightarrow$ tref (Material fit パラメータ),
 $T \rightarrow$ temhi: 要素ieの層iの温度

```
C
C   MWD shift of shear thinning
```

$$\eta_0(t) = \left(\frac{M_w(t)}{M_w(0)}\right)^{3.7} \eta_0(0)$$

```
C
C   dc=chempar(6,ie)/commonvpar(2)
Corg eta=eta0/(1.0+(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
C   eta=eta0/(1.0+dc*(eta0*gamm/rcoef)**(1.0-dn))
```

$$dc = \frac{M_z(t)/M_w(t)}{M_z(0)/M_w(0)}$$

```
C
C   vish(i,ie,ib)=omgc*eta+(1.0-omgc)*vishold
C   end if
```

```
C
C   if(temh(i,ie,ib).le.templower) then
C       vish(i,ie,ib)=solidvis
C   end if
```

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + dc * \exp\left(\frac{\eta_0 * gamm}{rcoef}\right)^{1-dn}}$$

dc → 反応によるshear thinning 性の変化を表現するパラメータ

rcoef : Material fit パラメータ

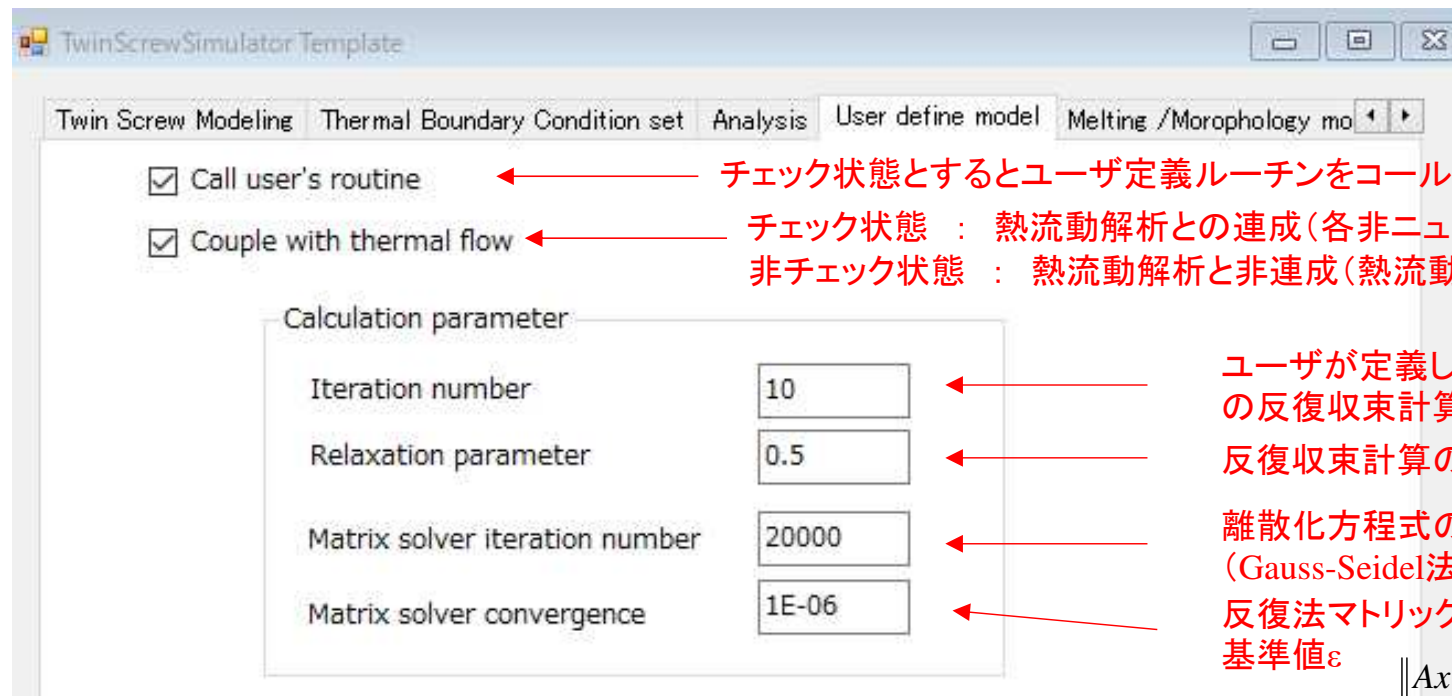
gamm : 要素の層iのひずみ速度

vish(i,ie,ib) : 要素ieの層iのひずみ速度(ib=1)

omgc : 緩和パラメータ(0.5)

ユーザ定義ルーチンの利用方法

- 1) 公開されているソースコードを用途向きに書き直す.
- 2) Fortran compiler を利用して, 実行ファイルmultiprofilesimulator.exe 作成.
- 3) 実行ファイルmultiprofilesimulator.exe を¥bin¥x86¥Systemフォルダーにコピー.
- 4) GUIに新しく設けられたCall user's routine チェックボックスをチェック状態とする.
- 5) 従来通りの方法に従ってプログラムを実行.



チェック状態とするとユーザ定義ルーチンをコール

チェック状態 : 熱流動解析との連成(各非ニュートン反復計算毎にコール)
非チェック状態 : 熱流動解析と非連成(熱流動解析後にコール)

ユーザが定義した連立非線形偏微分方程式
の反復収束計算回数(線形の場合は1)

反復収束計算の緩和係数

離散化方程式の反復法マトリックスソルバー
(Gauss-Seidel法)の最大反復計算回数

反復法マトリックスソルバーの反復計算終了
基準値 ε

$$\frac{\|Ax - B\|}{\|B\|} \leq \varepsilon \rightarrow \text{反復計算終了}$$

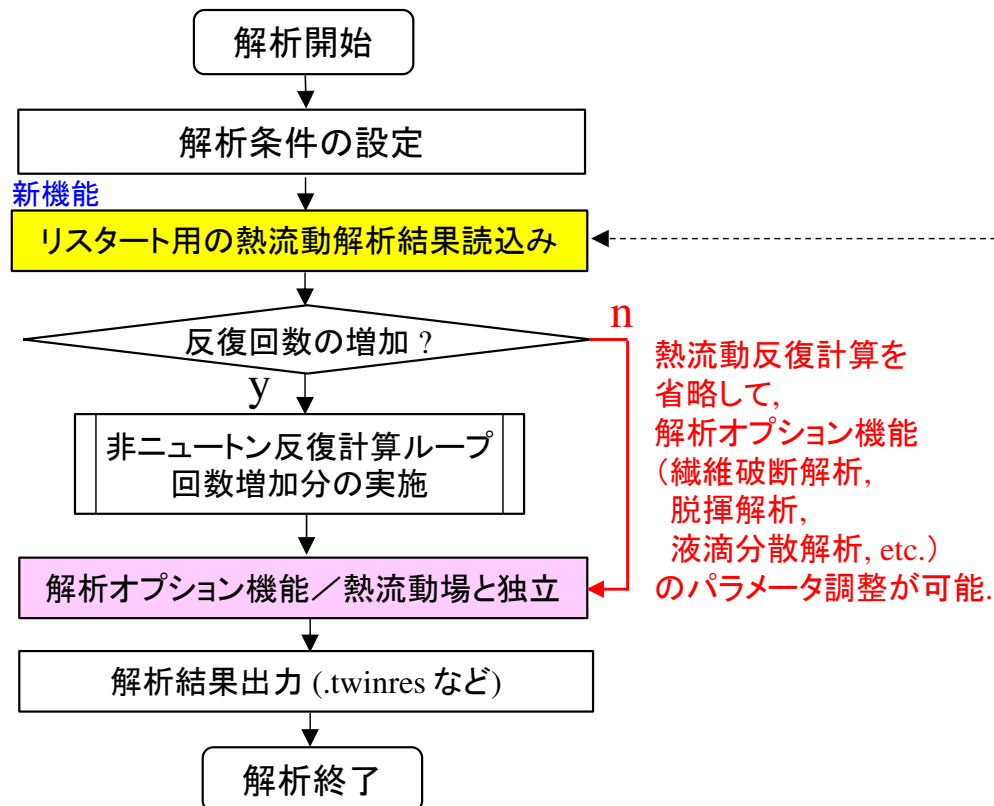
② ユーザ対応改良成果

- (1) 解析のリスタート機能
- (2) 解析の収束状況確認ファイル出力 (.calinf)
- (3) 液滴分裂/合体解析の調整パラメータ追加
- (4) Option Form の設定パラメータ保存

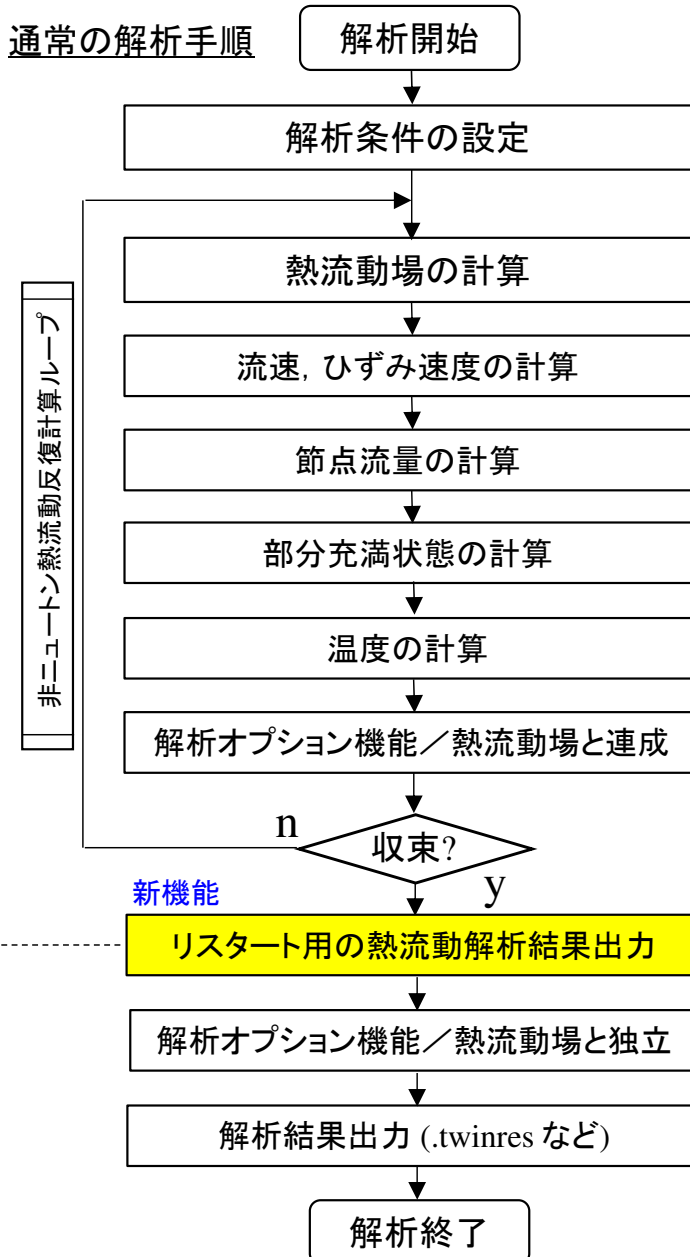
(1) 解析のリスタート機能

本機能を利用すると、熱流動反復計算ループ終了時の解析結果を再利用することで、計算時間の短縮を図ることができます。

リスタート解析手順



通常の解析手順



(1) 解析のリスタート機能

利用手順

(事前準備)

0. TSS Ver.9.0.0 で通常(従来通り)の解析を実施します.

⇒ リスタート用の熱流動解析結果を得ることが目的
解析条件ファイル名 .recalc が出力される.

(リスタート解析の条件設定方法)

1. Analysis タブ下段に設置された Recalculation欄の

☐ Recalculate にチェックを入れる.

⇒ Select ボタンをクリックし, 0. で解析済みの
解析条件ファイル.tscal を選択する.

TSS Ver.9.0.0 Analysisタブ 初期画面

(1) 解析のリスタート機能

利用手順

- 手順1. で解析条件ファイル(.tscal)を読み込むと、該当ファイルの解析条件内容が設定されます。
- リスタート解析で得られる解析結果ファイル名(.twinres, etc.)を別名で保存する場合は、Result File Name欄に設定された元の名前を変更します。
(変更しない場合は上書き保存されます。)
- リスタート解析で得られる解析条件ファイル名(.tscal)を4. の解析結果ファイル名と同じにする場合(推奨)には、Calculation Control Information File Name欄 右のCopyボタンをクリックすると、手順3. で設定した名前が反映されます。

TSS Ver.9.0.0 Analysisタブ / リスタート用解析条件ファイル読み込後

The screenshot shows the 'Analysis' tab in the TSS Ver.9.0.0 software. The 'Calculation Control Information File Name' field is highlighted with a blue box, and the 'Copy' button is also highlighted. A blue arrow points from the 'Copy' button to the 'Result File Name' field, which contains the text 'testpp_v9'. The 'Result File Name' field is also highlighted with a blue box. The 'Calculation Control Parameters' section is visible, showing various settings for the simulation, including 'Thermal-Flow Calculation Control Parameters', 'Inlet Boundary Condition', 'Outlet Boundary Condition', and 'Molding Condition'.

(1) 解析のリスタート機能

利用手順

5. リスタート解析の目的となる条件変更を行います。

【変更可能な項目】

- ・非ニュートン反復計算回数(元よりも多い場合に追加計算)
- ・解析オプション機能の各種パラメータ
 - Melting/Morphology model タブ
 - Binary System Condition Set タブ
 - Forming model タブ
 - Surface renewal model タブ

【変更不可能な項目】

- ・材料データ(.pro), メッシュモデルデータ(.twinmsh)
- ・非ニュートン熱流動反復計算ループに直接関係するパラメータ
 - Analysisタブで読み専用(灰色)になっている項目
 - Thermal Boundary Condition (熱境界条件)
- ・Dynamic解析はリスタート機能の対象範囲外になります。

6. 手順5. で条件変更後, 通常の解析と同様に, Analysis タブ 下段のSaveボタンをクリックして解析条件ファイルを保存し, Executeボタンをクリックすると, 元の解析条件ファイルの熱流動結果(.recalc) を利用したリスタート解析が実施されます。

TSS Ver.9.0.0 Analysisタブ / 名前変更および条件変更後

7. 解析条件保存および解析実行(従来通り)

(1) 解析のリスタート機能／解析事例

(A) 基準解析ケース／解析条件

Analysis Chemical Reaction Melting /Morphology model Binary System Condition Set Foaming model Sur

Calculation Control Information File Name
fam0002 Import

Material Property Information File Name
HDPE_B3 Import Select New

Model Information File Name
LD40 Select

Calculation Control Parameters

Thermal-Flow Calculation Control Parameters

Non-Newtonian Iteration Number 10 ☒ Static ☐ Dynamic

Layer Division Number 10

Temperature SOR iteration number 200 ☒ 2.5D FEM ☐ 1D FDM

☒ Intermeshing correction

Optional information

☒ Shear Cutoff ☐ Stress cutoff

Shear cutoff(1/s) 1E+10 No-flow temperature (°C) 100

No-flow viscosity(Pa · s) 1000 Viscous heating power ratio 1

Inlet Boundary Condition

Inlet Pressure(MPa) 0

Inlet Temperature(°C) 30

Outlet Boundary Condition

☐ Pressure fixed ☐ Mass Flux fixed

☒ Un-fill analysis ☐ Old version algorithm ☐ New version algorithm

Outlet Pressure(MPa) 1

Output(kg/h) 40

Boundary layer number 3

Molding Condition

Screw Rotational Number(RPM) 100

Unfill Analysis Condition

SOR iteration number 1000

☐ Result display considered with unfill

Result File Name fam0002

Recalculation

☐ Recalculate

Save Execute

- 樹脂データ : HDPE_B3 (Material fit データベース)
- スクリュモデル: バレル径20mm, L/D=40 (1600mm)

→ Flow direction



- バレル温度: 200°C Max. (スクリュ入口30°C)

- 解析条件: 未充填解析(Un-fill analysis)
押出量 40 kg/h,
出口圧力 1.0 MPa
スクリュ回転数 100rpm,

- オプション機能: 繊維破断解析(Fiber Attrition Model)

Fiber attrition model parameter

☒ Fiber attrition model calculation

☐ Explicit ☒ Implicit

Fiber information

Initial length 6000 μm

Diameter 17 μm

Young's modulus 73 GPa

Fiber number 1000

Dimension less parameters

Cb 0.002

S 0.25

ζ 3

Computational parameters

Relaxation coefficient 0.5

Calculation number 20

Segment number 10

破断頻度 P_i を決定
する主要パラメータ
(詳細は手引書参照)

$$P_i = C_b \gamma [1 - \exp(1 - \hat{\gamma})] \text{ for } \hat{\gamma} \geq 1,$$

$$P_i = 0 \text{ for } \hat{\gamma} < 1,$$

$$\hat{\gamma} = \frac{4\zeta\eta_m\dot{\gamma}_i^4}{\pi^3 E_f d_f^4}$$

(1) 解析のリスタート機能／解析事例

(A) 基準解析ケース／解析結果

○熱流動解析結果の概要(fam0002.twininf)

***** Thermal Flow Calculation End *****

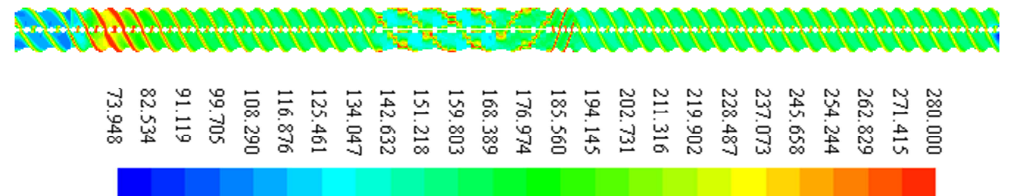
```
+++++ Screw Volume : 1550.355 cc
+++++ Volumetric flow : 14.4300164015385 cc/sec
+++++ Averaged residence time : 107.439593926848 sec
+++++ Torque : 705.1663 (Nm)
+++++ Power : 7384.566 (W)
+++++ Averaged outlet pressure : 1.000000 (MPa)
+++++ Averaged outlet temperature : 230.3468 (degree)
total : 1102.835 sec
```

○充填率分布

⇒ Flow direction

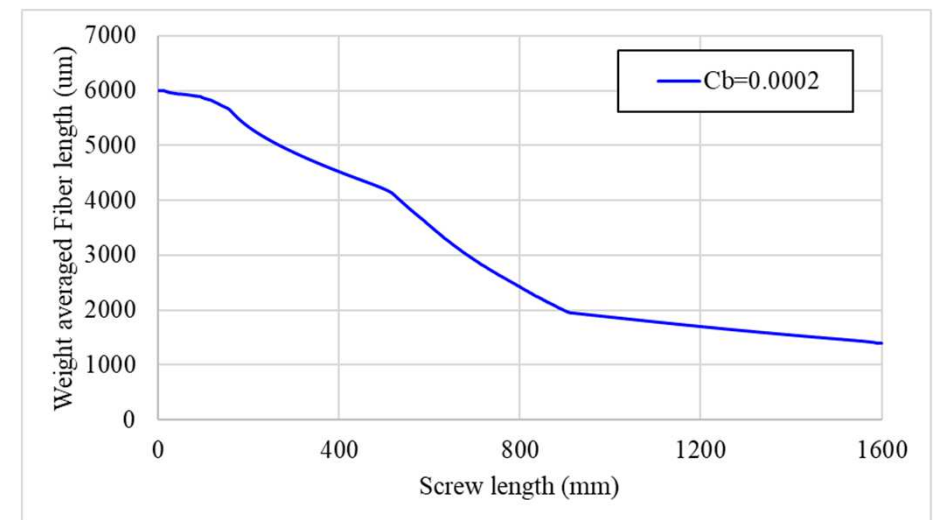
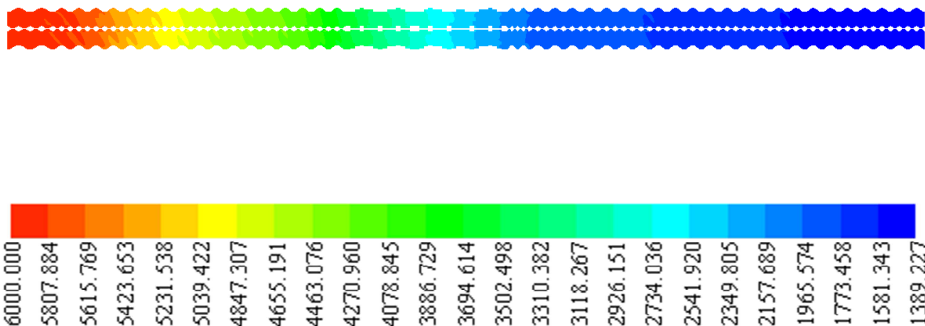


○応力分布(kPa)



○重量平均繊維長(um)

⇒ Flow direction



(1) 解析のリスタート機能／解析事例

(B) リスタート解析ケース

Thermal Boundary Condition Analysis Chemical Reaction Melting / Morphology model Binary System Condi

Calculation Control Information File Name
fam0004

Material Property Information File Name
HDPE_B3

Model Information File Name
LD40

☐ Thickness information set
☐ Use both information

Calculation Control Parameters

Thermal-Flow Calculation Control Parameters

Non-Newtonian Iteration Number ☒ Static ☐ Dynamic

Layer Division Number

Temperature SOR iteration number ☒ 2.5D FEM ☐ 1D FDM

☒ Intermeshing correction

Result File Name (B)の名前に変更

Recalculation / Set Original Calculation Control Parameters

☒ Recalculate (A)の結果を選択

Fiber attrition model parameter

☒ Fiber attrition model calculation

☐ Explicit ☒ Implicit

Fiber information

Initial length μm

Diameter μm

Young's modulus GPa

Fiber number

Dimension less parameters

Cb=0.004に変更

S

ζ

Computational parameters

Relaxation coefficient

Calculation number

Segment number

○熱流動解析結果の概要(fam0004.twininf)

***** ReCalculation of Optional Analysis Start *****

***** Fiber Attrition Model impcilt calculation start *****
***** Fiber Attribution Model implicit calculation end *****

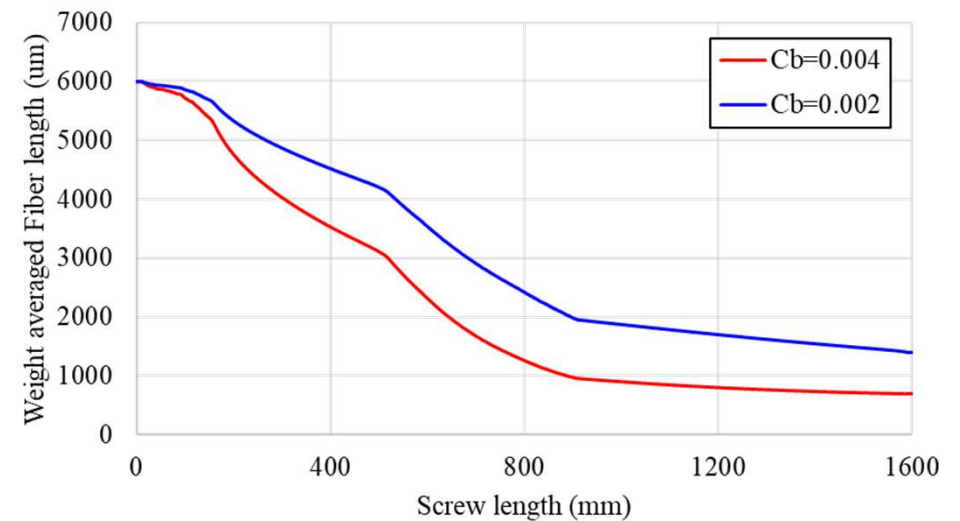
***** Recalucation End *****

+++++ Screw Volume : 1550.355 cc
+++++ Volumetric flow : 14.4300155639648 cc/sec
+++++ Averaged residence time : 107.439600163056 sec
+++++ Torque : 705.1663 (Nm)
+++++ Power : 7384.566 (W)
+++++ Averaged outlet pressure : 1.000000 (MPa)
+++++ Averaged outlet temperature : 230.3468 (degree)
total : 163.4432 sec

(A)の熱流動
解析結果を
使用.

熱流動反復計算を省略することで, 計算時間が
1,102 $\Rightarrow$ 163 sec に減少

○重量平均繊維長(um)



(2) 解析の収束状況確認ファイル出力 (.calinf)

本機能では、非ニュートン熱流動反復計算回数毎の、(1) スクリュ出口の押出量 (Mass flux, kg/h) および、(2) スクリュ出口の平均温度 (°C) を、解析結果ファイル名 .calinf ファイルに自動出力するようにしました。

.calinf ファイル(エクセルのカンマ区切りで開いた場合)

	(1) 押出量	(2) スクリュ出口平均温度
Iteration	Massflux(kg/h)	AverageOutletTemp(degree)
1	40.00000341	200
2	40.00000341	206.8288
3	40.00000341	222.0625
4	40.00000341	228.9126
5	40.00000341	231.0536
6	40.00000341	230.8538
7	40.00000341	230.6208
8	40.00000341	230.4721
9	40.00000341	230.3788
10	40.00000341	230.3468

↑ p.61 の (A)基準回帰ケースの例 (fam0002.calinf)

```

C:\Users\yoni\Desktop\TSSver9test\restartorg\multiprofilesimulator.exe
morcal= 0
tempcal:2.5D
irecal= 0
recalciter= 0
ichemdaicel: 0
multibinary: 0
ret datain
maxnode= 41480
maxelem= 40800
iblock= 1
tsnnode = 40840
**** Thermal Flow Calculation Start ****
***** Static Calculation *****

----- Mesh Information -----
Node Number : 61260
Element Number : 61200

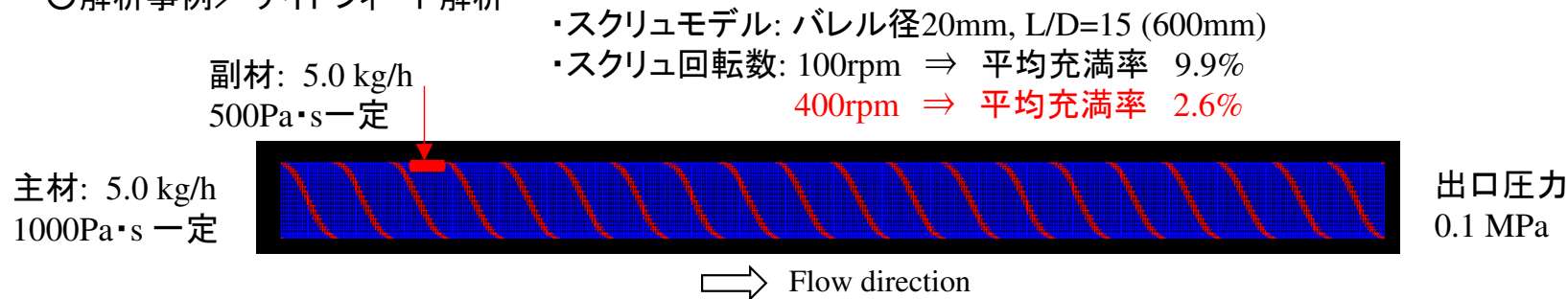
ioutletnodenum= 60 iinletnodenum= 60 iqbc= 2
flowrateoutlet= 14.4300155639648 mass fluxflowratesum= 0.0000000E+00
iteration = 1 / 10
iter= 1 call tempcal
**** flowrateoutlet : -14.4300164014591
flowoutlet= 14.4300164014591 cc/s : Mass flux= 40.0000034143757
kg/h
iteration = 2 / 10
iter= 2 call tempcal
**** flowrateoutlet : -14.4300164016079
flowoutlet= 14.4300164016079 cc/s : Mass flux= 40.0000034147883
kg/h
iteration = 3 / 10
iter= 3 call tempcal
**** flowrateoutlet : -14.4300164014980
flowoutlet= 14.4300164014980 cc/s : Mass flux= 40.0000034144837
kg/h
iteration = 4 / 10
iter= 4 call tempcal
**** flowrateoutlet : -14.4300164015714
flowoutlet= 14.4300164015714 cc/s : Mass flux= 40.0000034146870
kg/h

```

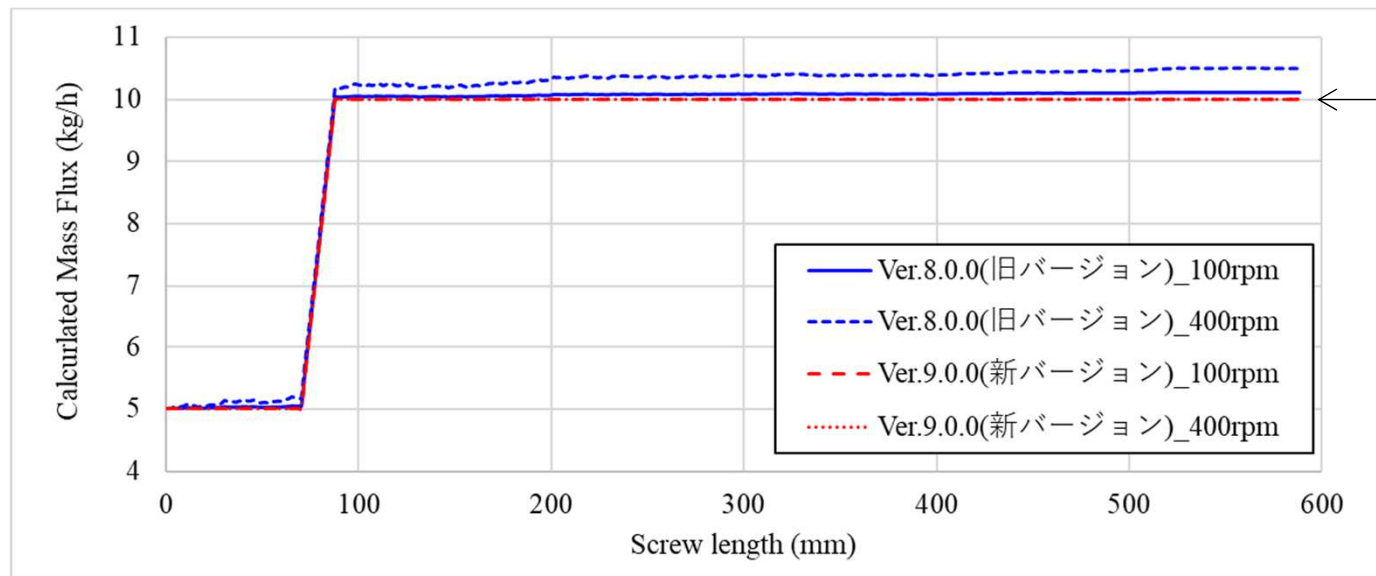
(2) 解析の収束状況確認ファイル出力 (.calinf)

.calinf で出力される押出量 Mass Flux は、スクリュ出口の解析結果になりますが、Ver.9.0.0 では熱流動解析の計算ルーチンを改良し、解析精度(流量収支)を向上させました。

○解析事例／サイドフィード解析



○解析結果／押出量(解析結果)のスクリュ軸方向依存性 (.binaryinf の Flux 出力結果から算出)



理論解 10.0 kg/h

旧バージョンでは、
充填率が極端に小さい場合に
流量収支に誤差が見られるが、
新バージョンでは、
平均充填率が2.6% (400rpm)
と極端に小さい場合でも
理論解と一致した。

(3) 液滴分裂/合体解析の調整パラメータ追加

本機能では, Ver.8.0.0で改良された液滴分裂解析において, キャピラリー数の算出に利用されるひずみ速度 $\dot{\gamma}$ の抽出範囲を調整するための設定項目を追加しました.
(理論の詳細は, TwinScrewSimulatorVer.8.0.0改良成果資料.pptx の p.44～を参照ください),

キャピラリー数 $Ca = \frac{\tau}{\sigma / R} = \frac{\eta_m \dot{\gamma}}{\sigma / R}$

Ca が大きいほど変形 or 分裂しやすい.

Ca : キャピラリー数
 τ : 応力
 σ : 表面張力係数
 R : 液滴半径
 η_m : マトリクス粘度
 $\dot{\gamma}$: ひずみ速度

Computational parameter for Morphological Evolution Model or Chemical Reaction Model

☒ Morphology evolution model calculation ☐ Chemical model calculation

Interfacial tension coefficient (N/m)

0.1

表面張力係数

液滴初期半径 → Droplet initial radius (μm) 2000

計算開始Z位置 → Calculation start Z-position(mm) 0

液材体積分率 → Volume fraction 0.05

液滴平衡径 → Equilibrium radius(μm) 1

Dimensionless time parameter a 91.41

Dimension less time parameter b 0.3397

無次元時定数のモデルパラメータ

Thickness criteria(mm) 0 ⇒ 設定値以上の肉厚要素をひずみ速度の抽出範囲とする。(肉厚下限値)

Material Property Information File Name

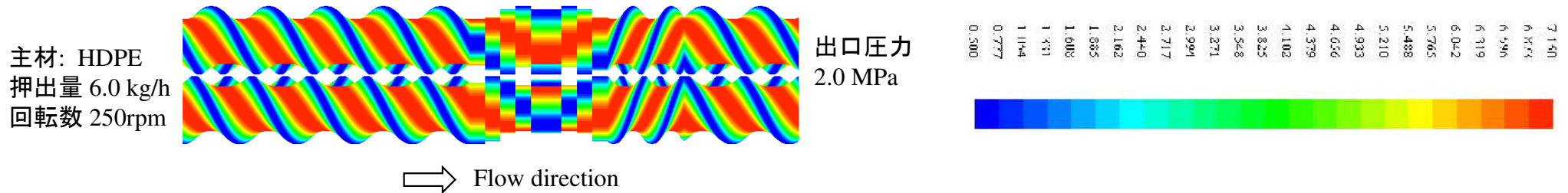
vis005 Import Select

液滴材料データ →

$t_b^* = a\lambda^b$,
 $a = 91.41$,
 $b = 0.3397$

(3) 液滴分裂/合体解析の調整パラメータ追加

○解析事例 ・スクリュモデル: バレル径20mm, L/D=8.05 (322mm)
最小肉厚: 0.5 mm



○解析条件: Thickness criteria (肉厚下限値) 違いの 3条件

(A) Thickness criteria: 0 mm
(デフォルト設定, スクリュ全領域の $\dot{\gamma}$ が抽出対象)

(B) Thickness criteria: 1 mm
⇒ 肉厚 1mm 以上の要素が $\dot{\gamma}$ の抽出対象.

(C) Thickness criteria: 2.5 mm
⇒ 肉厚 2.5mm 以上の要素が $\dot{\gamma}$ の抽出対象.

液滴材:
50 mPa·s 一定
⇒ 粘度比 10^{-5}
初期半径 2000um

Computational parameter for Moropological Evolution Model or Chemical Reaction Model

☒ Morphorogy evolution model calculation ☐ Chemical model calculation

Interfacial tension coefficient (N/m)

Droplet initial radius (μm)

Calculation start Z-position(mm)

Volume fraction

Equirilibrium radius(μm)

Dimensionless time parameter a

Dimension less time parameter b

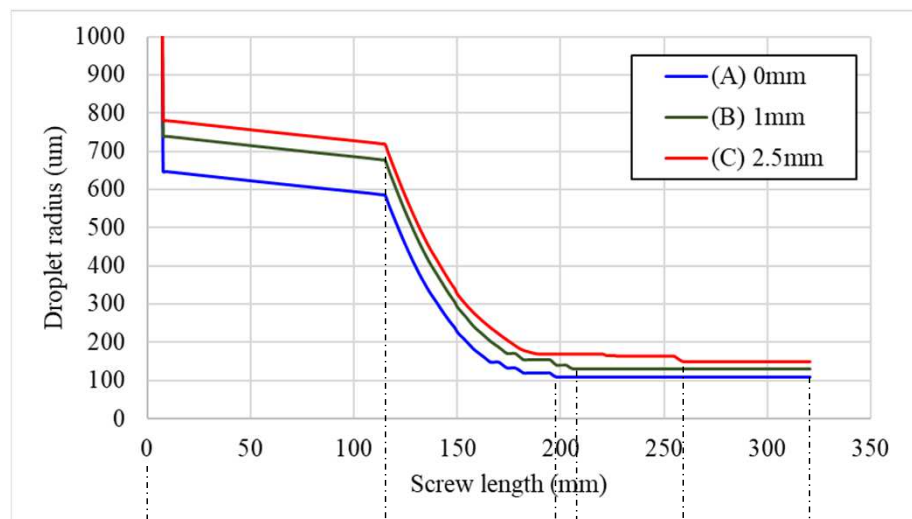
Thickness criteria(mm) (B)の設定例

Material Property Information File Name

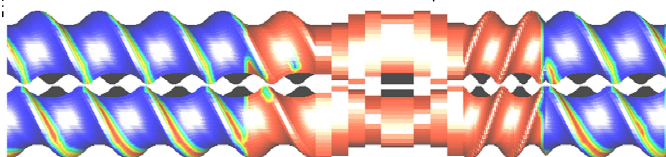
(3) 液滴分裂/合体解析の調整パラメータ追加

○解析結果:

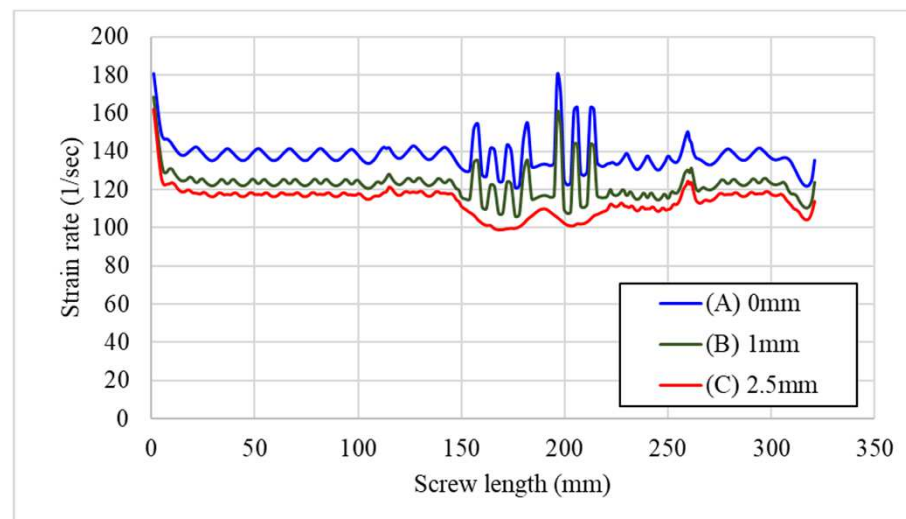
【 Thickness criteria vs. 液滴分散径 (Droplet radius) 】



【 充満率分布 】



【 Thickness criteria vs. ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ 】



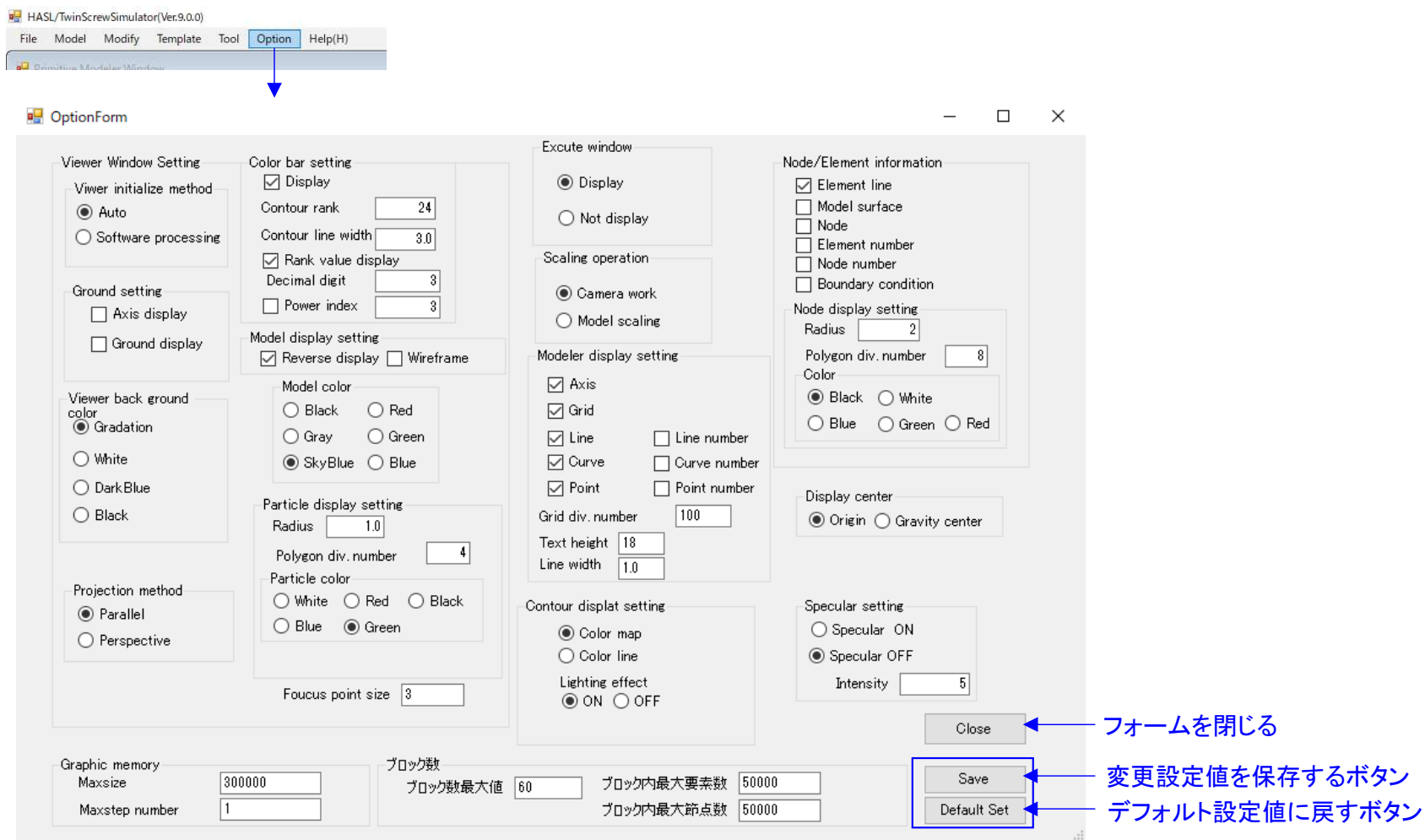
Thickness criteria が大きいほど、ひずみ速度 $\dot{\gamma}$ (周方向平均値) が小さくなるため、 Ca が減少し分散径が小さくなる。

また非ニュートン粘性流体の場合、 $\dot{\gamma}$ が小さくなるとマトリクス(主材)の粘度 η_m および液滴材の粘度 η_d も変化するため、粘度比 λ が変わり、分裂状態も変化する。

$$\lambda = \frac{\eta_d}{\eta_m} \quad \text{粘度比が大きいほど分裂し難い.}$$

(4) Option Form の設定パラメータ保存

本機能では、Option Form タブで変更された設定値をファイル保存し、次回起動時にも設定値を反映させることができます。



(4) Option Form の設定パラメータ保存

利用手順

1. 必要に応じて、Option Form の設定値を変更します。
(従来通り)
2. 変更した設定値を保存したい場合は、フォーム右下のSave ボタンをクリックします。以降のTSS起動時には保存時の設定値が初期設定されます。
3. 変更前のデフォルト設定値に戻したい場合は、フォーム右下の Default Set ボタンをクリックします。

The screenshot shows the 'OptionForm' dialog box with various settings. Annotations with arrows point to specific fields and buttons:

- An arrow points to the 'Maxsize' field in the 'Graphic memory' section, which is set to 800000.
- An arrow points to the 'ブロック数' (Block count) label, with a sub-label 'ブロック数最大値' (Maximum block count) pointing to the '60' value in the adjacent field.
- An arrow points to the 'ブロック内最大要素数' (Maximum elements per block) label, with a sub-label 'ブロック内最大節点数' (Maximum nodes per block) pointing to the '60000' value in the adjacent field.
- An arrow points to the 'Save' button in the bottom right corner.
- An arrow points to the 'Default Set' button in the bottom right corner.

(変更例) メッシュサイズが大きく、解析結果描画時にメモリエラーが発生する場合には、デフォルト値 300,000 よりも大きくすると改善する。

(変更例) メッシュサイズが大きく、メッシュデータ保存時に要素数または節点数がデフォルト値の50,000以上の場合、最大要素数または最大設定数を大きくすると(ブロック数はエレメント数に応じて削減する)メッシュデータ保存時のメモリエラーが解消する。

③ TSSカスタマイズ機能

ユーザ定義ルーチン / Fortran compiler の利用方法

TSS Ver.9.0.0 で利用可能な開発環境／下表2種類のいずれかを利用して下さい.

開発環境(compiler)	解析で使用するマトリクスソルバ	使用PCのOS (Operating System)
① Intel Fortran	SMSソルバライブラリ (TSS標準ソルバ)	Windows
② GFortran (GNU Fortran)	当社自社開発ソルバ	Windows (MinGWを使用)

インストールおよびコンパイル方法(当社実施事例)は以下の別資料を参照ください.
- TwinScrewSimulatorVer9.0.0(2022)TSSカスタマイズ環境設定方法.pdf

(参考) TSS Ver.9.0.0 /GPU対応版(Ver.8.0.0 から提供) はユーザ定義ルーチンのサポート対象外になりますが、ユーザ定義ルーチン以外の解析には使用可能です。

開発環境(compiler)	解析で使用するマトリクスソルバ	使用PCのOS(operating system)
NVIDIA nvfortran	CUDAライブラリ(TSS/GPU版標準ソルバ)	Linux (PGI Fortranは2021年に販売停止)

* TSS/GPU対応版が利用可能なPC環境は、下記2点を満たす必要があります。

1. NVIDIA グラフィックボードが搭載されていること。
2. GPUのCUDA Computer Capability (グラフィックスボードのハードウェアバージョン) が7.5以下であること。

当社社開発環境 GPU:Nvidia GeForce GTX 1660 Ti, CUDA Computer Capability: 7.5, Compiler: PGI Community Edition

TSS Ver.9.0.0 フォルダ構成

TwinScrewSimulatorVer9.0.0¥bin¥x86 内に3つのSystemフォルダが存在します.



名前	更新日時	種類	サイズ
Systemver.9.0.0	2022/08/1...	ファイル フォルダー	
Systemver.9.0.0_GFORT	2022/08/1...	ファイル フォルダー	
Systemver.9.0.0_GPU	2022/08/1...	ファイル フォルダー	

フォルダの内容と対象ユーザ

標準仕様

Systemver.9.0.0	【TSS/標準版】：通常解析を実施されるユーザ	①Intel Fortranを利用されるユーザ
Systemver.9.0.0_GPU	【TSS/GPU版】：GPUを利用されるユーザ(利用可能なPC環境はp.52参照)	
Systemver.9.0.0_GFORT	：②GFortranを利用されるユーザ	